

69

(2)

(12)特許協力条約に基づいて公開された国際出願

com
70US
2005/0214560(19) 世界知的所有権機関
国際事務局(43) 国際公開日
2003 年 10 月 23 日 (23.10.2003)

PCT

(10) 国際公開番号
WO 03/087023 A1(51) 国際特許分類: C07C 15/60, 13/66, 13/567, 211/54,
C07D 209/86, 215/04, C09K 11/06, H05B 33/14, 33/22

(21) 国際出願番号: PCT/JP03/04905

(22) 国際出願日: 2003 年 4 月 17 日 (17.04.2003)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願2002-114400 2002 年 4 月 17 日 (17.04.2002) JP(71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): 出光興
産株式会社 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) [JP/JP];
〒100-8321 東京都千代田区丸の内三丁目1番1号
Tokyo (JP).

(72) 発明者; および

(75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 池田 秀嗣
(IKEDA, Hidetsugu) [JP/JP]; 〒299-0205 千葉県袖
ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 松浦 正英(MATSUURA, Masahide) [JP/JP]; 〒299-0205 千葉県
袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 舟橋 正和
(FUNAHASHI, Masakazu) [JP/JP]; 〒299-0205 千葉県
袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 細川 地潮
(HOSOKAWA, Chishio) [JP/JP]; 〒299-0205 千葉県袖
ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).(74) 代理人: 大谷 保, 外(OHTANI, Tamotsu et al.); 〒
105-0001 東京都港区虎ノ門3丁目25番2号ブ
リヂストン虎ノ門ビル6階 Tokyo (JP).

(81) 指定国 (国内): CN, IN, KR, US.

(84) 指定国 (広域): ヨーロッパ特許 (AT, BE, BG, CH, CY,
CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC,
NL, PT, RO, SE, SI, SK, TR).添付公開書類:
— 国際調査報告書2文字コード及び他の略語については、定期発行される
各PCTガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語
のガイダンスノート」を参照。(54) Title: NOVEL AROMATIC COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT CONTAINING THE
SAME

(54) 発明の名称: 新規芳香族化合物及びそれを利用した有機エレクトロルミネッセンス素子

(57) Abstract: A novel aromatic compound having an anthracene skeleton and an asymmetric molecular structure; and an organic
electroluminescent element which comprises a negative electrode, a positive electrode, and sandwiched therebetween one or more
organic thin-film layers comprising a luminescent layer, wherein at least one of the organic thin-film layers contains the aromatic
compound alone or as a component of a mixture. The organic electroluminescent element has a high luminance and a high lumines-
cent efficiency, has a high color purity, and emits a blue light. It further has excellent high-temperature stability and a long life. The
novel aromatic compound enables this element to be provided.(57) 要約: 本発明は、アントラセン骨格を有し非対称な分子構造を保有する新規芳香族化合物、及び、陰極と陽極
間に少なくとも発光層を含む一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機エレクトロルミネッセンス
素子において、該有機薄膜層の少なくとも1層が、前記芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有する
有機エレクトロルミネッセンス素子であり、発光輝度及び発光効率が高く、色純度が高く、青色系に発光し、さら
に高温安定性に優れ長寿命の有機エレクトロルミネッセンス素子及びそれを提供可能な新規芳香族化合物を提供す
るものである。

WO 03/087023 A1

明 細 書

新規芳香族化合物及びそれを利用した有機エレクトロルミネッセンス素子

技術分野

本発明は、新規な芳香族化合物及びそれを利用した有機エレクトロルミネッセンス素子（有機EL素子）に関し、特に、発光輝度及び発光効率が高く、色純度が高く、青色系に発光し、さらに高温安定性に優れ長寿命の有機EL素子を提供可能な新規芳香族化合物及びそれを利用した有機EL素子に関するものである。

背景技術

有機EL素子は、電界を印加することより、陽極より注入された正孔と陰極より注入された電子の再結合エネルギーにより蛍光性物質が発光する原理を利用した自発光素子である。イーストマン・コダック社のC. W. Tangらによる積層型素子による低電圧駆動有機EL素子の報告（C. W. Tang, S. A. Vanslyke, アプライドフィジックスレターズ（Applied Physics Letters）, 51巻、913頁、1987年等）がなされて以来、有機材料を構成材料とする有機EL素子に関する研究が盛んに行われている。Tangらは、トリス（8-ヒドロキシキノリノールアルミニウム）を発光層に、トリフェニルジアミン誘導体を正孔輸送層に用いている。積層構造の利点としては、発光層への正孔の注入効率を高めること、陰極より注入された電子をブロックして再結合により生成する励起子の生成効率を高めること、発光層内で生成した励起子を閉じ込めること等が挙げられる。この例のように有機EL素子の素子構造としては、正孔輸送（注入）層、電子輸送発光層の2層型、または正孔輸送（注入）層、発光層、電子輸送（注入）層の3層型等がよく知られている。こうした積層型構造素子では注入された正孔と電子の再結合効率を高めるため、素子構造や形成方法の工夫がなされている。

また、発光材料としてはトリス（８－キノリノラート）アルミニウム錯体等のキレート錯体、クマリン誘導体、テトラフェニルブタジエン誘導体、ビススチリルアリーレン誘導体、オキサジアゾール誘導体等の発光材料が知られており、それらからは青色から赤色までの可視領域の発光が得られることが報告されており、カラー表示素子の実現が期待されている（例えば、特開平８－２３９６５５号公報、特開平７－１３８５６１号公報、特開平３－２００２８９号公報等）。

また、発光材料としてフェニルアントラセン誘導体を用いた素子は特開平８－０１２６００に開示されている。このようなアントラセン誘導体は青色発光材料として用いられるが、さらに高効率発光が求められていた。一方、素子寿命を伸ばすように薄膜の安定性が求められており、従来アントラセン誘導体は結晶化し薄膜が破壊される場合が多く改善が求められていた。例えば、米国特許０５９３５７１号明細書には、ジナフチルアントラセン化合物が開示されている。しかしこの化合物は左右及び上下の対称性の分子構造であるため、高温保存及び高温駆動において容易に配列し結晶化が生じる。また、特開２０００－２７３０５６号公報に左右非対称のアリルアントラセン化合物が開示されているが、アントラセンジールに置換する基の一方が、単純なフェニル基やビフェニル基であり結晶化を防ぐことはできなかった。

発明の開示

本発明は、前記の課題を解決するためになされたもので、発光輝度及び発光効率が高く、色純度が高く、青色系に発光し、さらに高温安定性に優れ長寿命の有機ＥＬ素子を提供可能な新規芳香族化合物及びそれを利用した有機ＥＬ素子を提供することを目的とする。

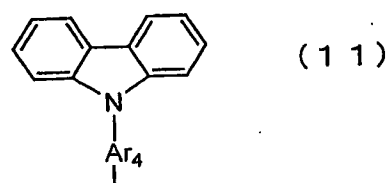
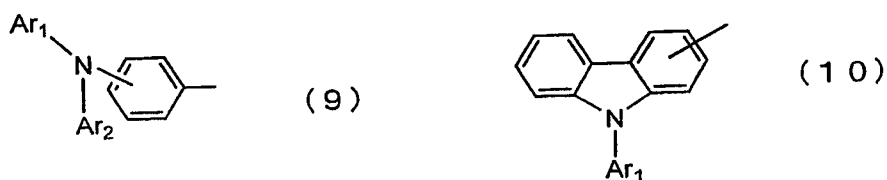
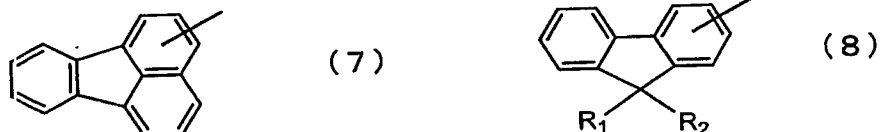
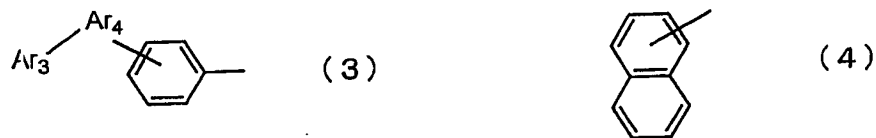
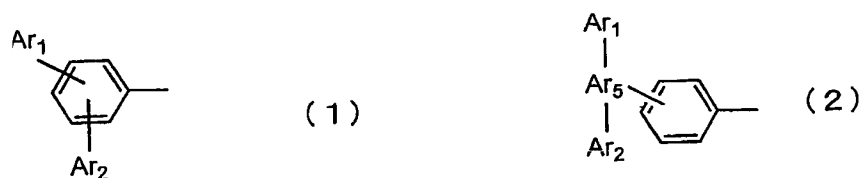
本発明者らは、前記課題を解決するために鋭意検討した結果、高ガラス転移温度であり、かつ非対称な分子構造を保有する化合物を有機ＥＬ素子の有機薄膜層の材料として用いることにより、前記の課題を解決することを見出し本発明を解

決するに至った。

すなわち、本発明は、下記一般式 (A) 又は (B) で表される新規な芳香族化合物である。

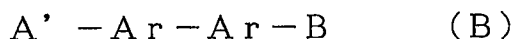


〔式中、Arは、置換もしくは無置換のアントラセンディール基である。Bは、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が1置換した炭素数2～60の複素環基又は置換もしくは無置換の炭素数5～60のアリール基である。Aは、下記一般式(1)～(11)から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されていてもよい。但し、Bがアリールアミノ基で置換されている場合は、Aはアリールアミノ基で置換されたフェニル基ではない。〕

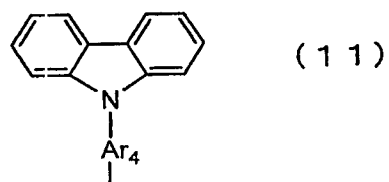
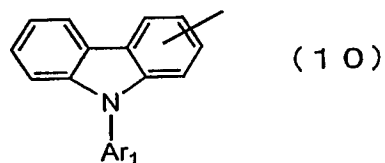
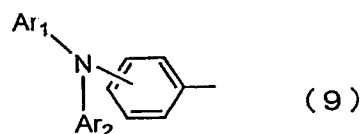
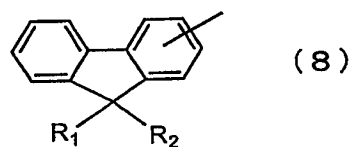
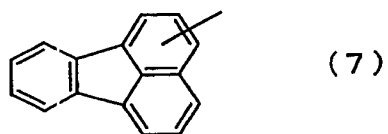
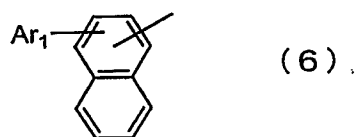
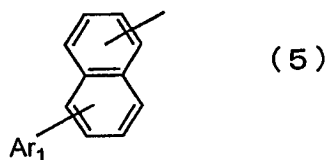
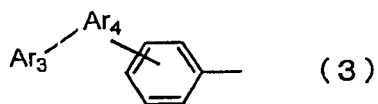
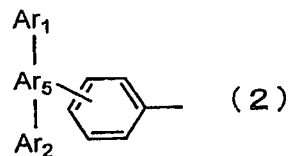
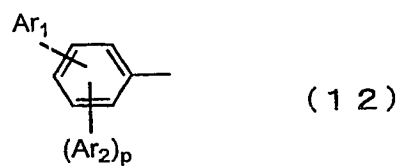


(式中、 $Ar_1 \sim Ar_3$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリール基、 Ar_4 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基、 Ar_5 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 の 3 価の芳香族残基である。 R_1 及び R_2 は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換の炭

素数 1 ～ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 40 のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 40 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ～ 40 のシリル基、又はカルボキシル基である。また、 Ar_1 と Ar_2 及び R_1 と R_2 は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。)]



〔式中、 Ar は、置換もしくは無置換のアントラセンディール基である。B は、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が 1 置換した炭素数 2 ～ 60 の複素環基又は置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 60 のアリール基である。A' は、下記一般式 (2) ～ (12) から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されていてもよい。但し、B がアリールアミノ基で置換されている場合は、A' はアリールアミノ基で置換されたフェニル基ではない。〕



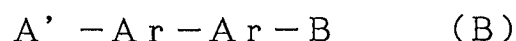
(式中、 $Ar_1 \sim Ar_3$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリール基、 Ar_4 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基、 Ar_5 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 の 3 価の芳香族残基である。 R_1 及び R_2 は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、

置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 40 のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 40 のアリアルオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ～ 40 のシリル基、又はカルボキシル基である。また、 Ar_1 と Ar_2 及び R_1 と R_2 は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。式 (12) の p は、0 又は 1 である。
)]

また、本発明は、陰極と陽極間に少なくとも発光層を含む一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機エレクトロルミネッセンス素子において、該有機薄膜層の少なくとも 1 層が、前記一般式 (A) 又は (B) で表される芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有する有機エレクトロルミネッセンス素子を提供するものである。

発明を実施するための最良の形態

本発明は、下記一般式 (A) 又は (B) で表される新規な芳香族化合物である。



上記一般式 (A) 又は (B) において、 Ar は、置換もしくは無置換のアントラセンデノール基である。

上記一般式 (A) 又は (B) において、 B は、アルケニル基もしくはアリアルアミノ基が 1 置換した炭素数 2 ～ 60 の複素環基又は置換もしくは無置換の炭素

数5～60のアリール基であり、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が1置換した炭素数2～60の複素環基又はアルケニル基もしくはアリールアミノ基が1置換した炭素数5～60のアリール基であると好ましい。

Bの置換基であるアルケニル基としては、例えば、ビニル基、アリル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、1,3-ブタンジエニル基、1-メチルビニル基、スチリル基、2,2-ジフェニルビニル基、2,2-ジトリルビニル基、1,2-ジトリルビニル基、1-メチルアリル基、1-ジメチルアリル基、2-メチルアリル基、1-フェニルアリル基、2-フェニルアリル基、3-フェニルアリル基、3,3-ジフェニルアリル基、1,2-ジメチルアリル基、1-フェニル-1-ブテニル基、3-フェニル-1-ブテニル基等が挙げられる。

Bの置換基であるアリールアミノ基としては、例えば、フェニルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ビフェニルアミノ基、ナフチルアミノ基、アントラニルアミノ基、ジトリルアミノ基、ジナフチルアミノ基、フェニルナフチルアミノ基、フェニルメチルアミノ基、ピレニルフェニルアミノ基、ビフェニルアミノ基、ビフェニルナフチルアミノ基等が挙げられる。

Bの置換又は無置換の複素環基としては、例えば、1-ピロリル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、1-インドリル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、2-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベン

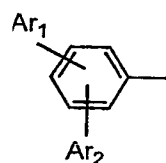
ゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、2-キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノリル基、4-イソキノリル基、5-イソキノリル基、6-イソキノリル基、7-イソキノリル基、8-イソキノリル基、2-キノキサリニル基、5-キノキサリニル基、6-キノキサリニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、9-カルバゾリル基、1-フェナンスリジニル基、2-フェナンスリジニル基、3-フェナンスリジニル基、4-フェナンスリジニル基、6-フェナンスリジニル基、7-フェナンスリジニル基、8-フェナンスリジニル基、9-フェナンスリジニル基、10-フェナンスリジニル基、1-アクリジニル基、2-アクリジニル基、3-アクリジニル基、4-アクリジニル基、9-アクリジニル基、1, 7-フェナンスロリン-2-イル基、1, 7-フェナンスロリン-3-イル基、1, 7-フェナンスロリン-4-イル基、1, 7-フェナンスロリン-5-イル基、1, 7-フェナンスロリン-6-イル基、1, 7-フェナンスロリン-8-イル基、1, 7-フェナンスロリン-9-イル基、1, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1, 8-フェナンスロリン-2-イル基、1, 8-フェナンスロリン-3-イル基、1, 8-フェナンスロリン-4-イル基、1, 8-フェナンスロリン-5-イル基、1, 8-フェナンスロリン-6-イル基、1, 8-フェナンスロリン-7-イル基、1, 8-フェナンスロリン-9-イル基、1, 8-フェナンスロリン-10-イル基、1, 9-フェナンスロリン-2-イル基、1, 9-フェナンスロリン-3-イル基、1, 9-フェナンスロリン-4-イル基、1, 9-フェナンスロリン-5-イル基、1, 9-フェナンスロリン-6-イル基、1, 9-フェナンスロリン-7-イル基、1, 9-フェナンスロリン-8-イル基、1, 9-フェナンスロリン-10-イル基、1, 10-フェナンスロリン-2-イル基、1, 10-フェナンスロリン-3-イル基、1, 10-フェナンスロリン-4-イル基、1, 10-フェナンスロリン-5-イル基、

2, 9-フェナンスロリン-1-イル基、2, 9-フェナンスロリン-3-イル基、2, 9-フェナンスロリン-4-イル基、2, 9-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-6-イル基、2, 9-フェナンスロリン-7-イル基、2, 9-フェナンスロリン-8-イル基、2, 9-フェナンスロリン-10-イル基、2, 8-フェナンスロリン-1-イル基、2, 8-フェナンスロリン-3-イル基、2, 8-フェナンスロリン-4-イル基、2, 8-フェナンスロリン-5-イル基、2, 8-フェナンスロリン-6-イル基、2, 8-フェナンスロリン-7-イル基、2, 8-フェナンスロリン-9-イル基、2, 8-フェナンスロリン-10-イル基、2, 7-フェナンスロリン-1-イル基、2, 7-フェナンスロリン-3-イル基、2, 7-フェナンスロリン-4-イル基、2, 7-フェナンスロリン-5-イル基、2, 7-フェナンスロリン-6-イル基、2, 7-フェナンスロリン-8-イル基、2, 7-フェナンスロリン-9-イル基、2, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1-フェナジニル基、2-フェナジニル基、1-フェノチアジニル基、2-フェノチアジニル基、3-フェノチアジニル基、4-フェノチアジニル基、10-フェノチアジニル基、1-フェノキサジニル基、2-フェノキサジニル基、3-フェノキサジニル基、4-フェノキサジニル基、10-フェノキサジニル基、2-オキサゾリル基、4-オキサゾリル基、5-オキサゾリル基、2-オキサジアゾリル基、5-オキサジアゾリル基、3-フラザニル基、2-チエニル基、3-チエニル基、2-メチルピロール-1-イル基、2-メチルピロール-3-イル基、2-メチルピロール-4-イル基、2-メチルピロール-5-イル基、3-メチルピロール-1-イル基、3-メチルピロール-2-イル基、3-メチルピロール-4-イル基、3-メチルピロール-5-イル基、2-ト-ブチルピロール-4-イル基、3-(2-フェニルプロピル)ピロール-1-イル基、2-メチル-1-インドリル基、4-メチル-1-インドリル基、2-メチル-3-インドリル基、4-メチル-3-インドリル基、2-ト-ブチル-1-インドリル基、4-ト-ブチル-1-

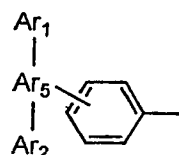
インドリル基、2-トープチル3-インドリル基、4-トープチル3-インドリル基等が挙げられ、前記置換基を含み炭素数2～60のものである。

Bのアリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、アントラニル基、フェナンスリル基、ピレニル基、コロニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ピローリル基、フラニル基、チオフェニル基、ベンゾチオフェニル基、オキサジアゾリル基、ジフェニルアントラニル基、インドリル基、カルバゾリル基、ピリジル基、ベンゾキノリル基、フルオランテニル基、アセナフトフルオランテニル基等が挙げられ、前記置換基を含み炭素数5～60のものである。

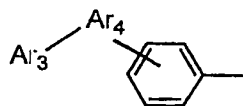
上記一般式(A)において、Aは、下記一般式(1)～(11)から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されていてもよい。但し、Bがアリールアミノ基で置換されている場合は、Aはアリールアミノ基で置換されたフェニル基ではない。



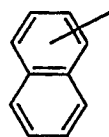
(1)



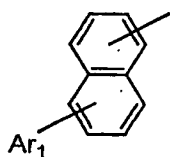
(2)



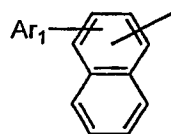
(3)



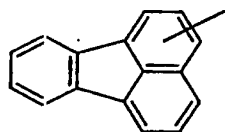
(4)



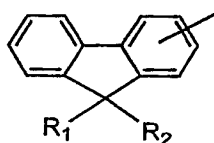
(5)



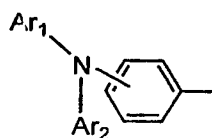
(6)



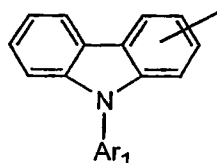
(7)



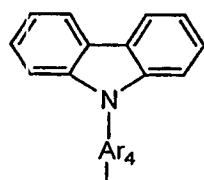
(8)



(9)



(10)



(11)

(1) ~ (11) 式中、 $Ar_1 \sim Ar_3$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 6 ~ 30 のアリール基、 Ar_4 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、 Ar_5 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ~ 30 の 3 価の芳香族残基である。 R_1 及び R_2 は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換も

しくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 40 のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 40 のアリーロキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルコシキカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ～ 40 のシリル基、又はカルボキシル基である。また、 Ar_1 と Ar_2 及び R_1 と R_2 は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。

$Ar_1 \sim Ar_3$ の置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、アントラニル基、フェナンスリル基、ピレニル基、コロニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ピローリル基、フラニル基、チオフェニル基、ベンゾチオフェニル基、オキサジアゾリル基、ジフェニルアントラニル基、インドリル基、カルバゾリル基、ピリジル基、ベンゾキノリル基、フルオランテニル基、アセナフトフルオランテニル基等が挙げられる。

Ar_4 の置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基としては、フェニレン基、ナフチレン基、アントラニレン基、フェナンスリレン基、ピレニレン基、コロニレン基、ビフェニレン基、ターフェニレン基、ピローリレン基、フラニレン基、チオフェニレン基、ベンゾチオフェニレン基、オキサジアゾリレン基、ジフェニルアントラニレン基、インドリレン基、カルバゾリレン基、ピリジレン基、ベンゾキノリレン基、フルオランテニレン基、アセナフトフルオランテニレン基等が挙げられる。

R_1 及び R_2 のハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素が挙げられる。

R_1 及び R_2 の置換もしくは無置換のアミノ基としては、 $-NX_1X_2$ と表され、 X_1 、 X_2 の例としてはそれぞれ独立に、水素原子、メチル基、エチル基、

プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシn-ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロエチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロn-ブチル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモn-ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨードn-ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノn-ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノn-ブチル基、1, 2, 3-トリアシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、2-ニトロイソブチル基、1, 2-ジニトロエチル基、1, 3-ジニトロイソプロピル基、2, 3-ジニトロn-ブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントリル基、2-アントリル基、9-アントリル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル

基、4-スチリルフェニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、2-ビフェニルイル基、3-ビフェニルイル基、4-ビフェニルイル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、o-トリル基、m-トリル基、p-トリル基、p-tert-ブチルフェニル基、p-(2-フェニルプロピル)フェニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、4-メチル-1-アントリル基、4'-メチルビフェニルイル基、4''-tert-ブチル-p-ターフェニル-4-イル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベンゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、2-キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノリル基、4-イソキノリル基、5-イソキノリル基、6-イソキノリル基、7-イソキノリル基、8-イソキノリル基、2-キノキサリニル基、5-キノキサリニル基、6-キノキサリニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、1-フェナンスリジニル基、2-フェナンスリジニル基、3-フェナンスリジニル基、4-フェナンスリジニル基、6-フェナンスリジニル基、7-フェナンスリジニル基、8-フェナンスリジニル基、9-フェナンスリジニル基、10-フェナンス

リジニル基、1-アクリジニル基、2-アクリジニル基、3-アクリジニル基、4-アクリジニル基、9-アクリジニル基、1, 7-フェナンスロリン-2-イル基、1, 7-フェナンスロリン-3-イル基、1, 7-フェナンスロリン-4-イル基、1, 7-フェナンスロリン-5-イル基、1, 7-フェナンスロリン-6-イル基、1, 7-フェナンスロリン-8-イル基、1, 7-フェナンスロリン-9-イル基、1, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1, 8-フェナンスロリン-2-イル基、1, 8-フェナンスロリン-3-イル基、1, 8-フェナンスロリン-4-イル基、1, 8-フェナンスロリン-5-イル基、1, 8-フェナンスロリン-6-イル基、1, 8-フェナンスロリン-7-イル基、1, 8-フェナンスロリン-9-イル基、1, 8-フェナンスロリン-10-イル基、1, 9-フェナンスロリン-2-イル基、1, 9-フェナンスロリン-3-イル基、1, 9-フェナンスロリン-4-イル基、1, 9-フェナンスロリン-5-イル基、1, 9-フェナンスロリン-6-イル基、1, 9-フェナンスロリン-7-イル基、1, 9-フェナンスロリン-8-イル基、1, 9-フェナンスロリン-10-イル基、1, 10-フェナンスロリン-2-イル基、1, 10-フェナンスロリン-3-イル基、1, 10-フェナンスロリン-4-イル基、1, 10-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-1-イル基、2, 9-フェナンスロリン-3-イル基、2, 9-フェナンスロリン-4-イル基、2, 9-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-6-イル基、2, 9-フェナンスロリン-7-イル基、2, 9-フェナンスロリン-8-イル基、2, 9-フェナンスロリン-10-イル基、2, 8-フェナンスロリン-1-イル基、2, 8-フェナンスロリン-3-イル基、2, 8-フェナンスロリン-4-イル基、2, 8-フェナンスロリン-5-イル基、2, 8-フェナンスロリン-6-イル基、2, 8-フェナンスロリン-7-イル基、2, 8-フェナンスロリン-9-イル基、2, 8-フェナンスロリン-10-イル基、2, 7-フェナンスロリン-1-イル基、2, 7-フェナンスロリン-3-イル

ル基、2, 7-フェナンスロリン-4-イル基、2, 7-フェナンスロリン-5-イル基、2, 7-フェナンスロリン-6-イル基、2, 7-フェナンスロリン-8-イル基、2, 7-フェナンスロリン-9-イル基、2, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1-フェナジニル基、2-フェナジニル基、1-フェノチアジニル基、2-フェノチアジニル基、3-フェノチアジニル基、4-フェノチアジニル基、1-フェノキサジニル基、2-フェノキサジニル基、3-フェノキサジニル基、4-フェノキサジニル基、2-オキサゾリル基、4-オキサゾリル基、5-オキサゾリル基、2-オキサジアゾリル基、5-オキサジアゾリル基、3-フラザニル基、2-チエニル基、3-チエニル基、2-メチルピロール-1-イル基、2-メチルピロール-3-イル基、2-メチルピロール-4-イル基、2-メチルピロール-5-イル基、3-メチルピロール-1-イル基、3-メチルピロール-2-イル基、3-メチルピロール-4-イル基、3-メチルピロール-5-イル基、2-ト-ブチルピロール-4-イル基、3-(2-フェニルプロピル)ピロール-1-イル基、2-メチル-1-インドリル基、4-メチル-1-インドリル基、2-メチル-3-インドリル基、4-メチル-3-インドリル基、2-ト-ブチル-1-インドリル基、4-ト-ブチル-1-インドリル基、2-ト-ブチル-3-インドリル基、4-ト-ブチル-3-インドリル基等が挙げられる。

R₁ 及び R₂ の置換もしくは無置換の炭素数 1~30 のアルキル基の例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシ-ト-ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロ

エチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロ-tert-ブチル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモ-tert-ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨード-tert-ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノ-tert-ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノ-tert-ブチル基、1, 2, 3-トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、2-ニトロイソブチル基、1, 2-ジニトロエチル基、1, 3-ジニトロイソプロピル基、2, 3-ジニトロ-tert-ブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基等が挙げられる。

R₁ 及び R₂ の置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 40 のアルケニル基の例としては、ビニル基、アリル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、1, 3-ブタンジエニル基、1-メチルビニル基、スチリル基、2, 2-ジフェニルビニル基、2, 2-ジトリルビニル基、1, 2-ジトリルビニル基、1-メチルアリル基、1-ジメチルアリル基、2-メチルアリル基、1-フェニルアリル基、2-フェニルアリル基、3-フェニルアリル基、3, 3-ジフェニルアリル基、1, 2-ジメチルアリル基、1-フェニル-1-ブテニル基、3-フェニル-1-ブテニル基等が挙げられる。

R₁ 及び R₂ の置換もしくは無置換の炭素数 5 ~ 40 のシクロアルキル基としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル

基、4-メチルシクロヘキシル基等が挙げられる。

R₁ 及び R₂ の置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基としては、-OY で表される基であり、Y の例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシ-t-ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロエチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロ-t-ブチル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモ-t-ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨード-t-ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノ-t-ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノ-t-ブチル基、1, 2, 3-トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、2-ニトロイソブチル基、1, 2-ジニトロエチル基、1, 3-ジニトロイソプロピル基、2, 3-ジニトロ-t-ブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基等が挙げられる。

R₁ 及び R₂ の置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 の芳香族炭化水素基の例としては、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントリル基、2-アントリル基、9-アントリル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、2-ビフェニルイル基、3-ビフェニルイル基、4-ビフェニルイル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、o-トリル基、m-トリル基、p-トリル基、p-tert-ブチルフェニル基、p-(2-フェニルプロピル)フェニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、4-メチル-1-アントリル基、4'-メチルビフェニルイル基、4''-tert-ブチル-p-ターフェニル-4-イル基等が挙げられる。

R₁ 及び R₂ の置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 の芳香族複素環基の例としては、1-ピロリル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、1-インドリル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、2-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベンゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、2-キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノ

リル基、4-イソキノリル基、5-イソキノリル基、6-イソキノリル基、7-イソキノリル基、8-イソキノリル基、2-キノキサリニル基、5-キノキサリニル基、6-キノキサリニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、9-カルバゾリル基、1-フェナンスリジニル基、2-フェナンスリジニル基、3-フェナンスリジニル基、4-フェナンスリジニル基、6-フェナンスリジニル基、7-フェナンスリジニル基、8-フェナンスリジニル基、9-フェナンスリジニル基、10-フェナンスリジニル基、1-アクリジニル基、2-アクリジニル基、3-アクリジニル基、4-アクリジニル基、9-アクリジニル基、1, 7-フェナンスロリン-2-イル基、1, 7-フェナンスロリン-3-イル基、1, 7-フェナンスロリン-4-イル基、1, 7-フェナンスロリン-5-イル基、1, 7-フェナンスロリン-6-イル基、1, 7-フェナンスロリン-8-イル基、1, 7-フェナンスロリン-9-イル基、1, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1, 8-フェナンスロリン-2-イル基、1, 8-フェナンスロリン-3-イル基、1, 8-フェナンスロリン-4-イル基、1, 8-フェナンスロリン-5-イル基、1, 8-フェナンスロリン-6-イル基、1, 8-フェナンスロリン-7-イル基、1, 8-フェナンスロリン-9-イル基、1, 8-フェナンスロリン-10-イル基、1, 9-フェナンスロリン-2-イル基、1, 9-フェナンスロリン-3-イル基、1, 9-フェナンスロリン-4-イル基、1, 9-フェナンスロリン-5-イル基、1, 9-フェナンスロリン-6-イル基、1, 9-フェナンスロリン-7-イル基、1, 9-フェナンスロリン-8-イル基、1, 9-フェナンスロリン-10-イル基、1, 10-フェナンスロリン-2-イル基、1, 10-フェナンスロリン-3-イル基、1, 10-フェナンスロリン-4-イル基、1, 10-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-1-イル基、2, 9-フェナンスロリン-3-イル基、2, 9-フェナンスロリン-4-イル基、2, 9-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-6-イ

ル基、2, 9-フェナンスロリン-7-イル基、2, 9-フェナンスロリン-8-イル基、2, 9-フェナンスロリン-10-イル基、2, 8-フェナンスロリン-1-イル基、2, 8-フェナンスロリン-3-イル基、2, 8-フェナンスロリン-4-イル基、2, 8-フェナンスロリン-5-イル基、2, 8-フェナンスロリン-6-イル基、2, 8-フェナンスロリン-7-イル基、2, 8-フェナンスロリン-9-イル基、2, 8-フェナンスロリン-10-イル基、2, 7-フェナンスロリン-1-イル基、2, 7-フェナンスロリン-3-イル基、2, 7-フェナンスロリン-4-イル基、2, 7-フェナンスロリン-5-イル基、2, 7-フェナンスロリン-6-イル基、2, 7-フェナンスロリン-8-イル基、2, 7-フェナンスロリン-9-イル基、2, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1-フェナジニル基、2-フェナジニル基、1-フェノチアジニル基、2-フェノチアジニル基、3-フェノチアジニル基、4-フェノチアジニル基、10-フェノチアジニル基、1-フェノキサジニル基、2-フェノキサジニル基、3-フェノキサジニル基、4-フェノキサジニル基、10-フェノキサジニル基、2-オキサゾリル基、4-オキサゾリル基、5-オキサゾリル基、2-オキサジアゾリル基、5-オキサジアゾリル基、3-フラザニル基、2-チエニル基、3-チエニル基、2-メチルピロール-1-イル基、2-メチルピロール-3-イル基、2-メチルピロール-4-イル基、2-メチルピロール-5-イル基、3-メチルピロール-1-イル基、3-メチルピロール-2-イル基、3-メチルピロール-4-イル基、3-メチルピロール-5-イル基、2-メチルピロール-4-イル基、3-(2-フェニルプロピル)ピロール-1-イル基、2-メチル-1-インドリル基、4-メチル-1-インドリル基、2-メチル-3-インドリル基、4-メチル-3-インドリル基、2-メチル-1-インドリル基、4-メチル-1-インドリル基、2-メチル-3-インドリル基、4-メチル-3-インドリル基等が挙げられる。

R₁ 及び R₂ の置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 40 のアラルキル基の例とし

ては、ベンジル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-*t*-ブチル基、 α -ナフチルメチル基、1- α -ナフチルエチル基、2- α -ナフチルエチル基、1- α -ナフチルイソプロピル基、2- α -ナフチルイソプロピル基、 β -ナフチルメチル基、1- β -ナフチルエチル基、2- β -ナフチルエチル基、1- β -ナフチルイソプロピル基、2- β -ナフチルイソプロピル基、1-ピロリルメチル基、2-(1-ピロリル)エチル基、*p*-メチルベンジル基、*m*-メチルベンジル基、*o*-メチルベンジル基、*p*-クロロベンジル基、*m*-クロロベンジル基、*o*-クロロベンジル基、*p*-ブロモベンジル基、*m*-ブロモベンジル基、*o*-ブロモベンジル基、*p*-ヨードベンジル基、*m*-ヨードベンジル基、*o*-ヨードベンジル基、*p*-ヒドロキシベンジル基、*m*-ヒドロキシベンジル基、*o*-ヒドロキシベンジル基、*p*-アミノベンジル基、*m*-アミノベンジル基、*o*-アミノベンジル基、*p*-ニトロベンジル基、*m*-ニトロベンジル基、*o*-ニトロベンジル基、*p*-シアノベンジル基、*m*-シアノベンジル基、*o*-シアノベンジル基、1-ヒドロキシ-2-フェニルイソプロピル基、1-クロロ-2-フェニルイソプロピル基等が挙げられる。

R₁ 及び R₂ の置換もしくは無置換の炭素数 6 ~ 40 のアリールオキシ基は、-OZ と表され、Z の例としてはフェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントリル基、2-アントリル基、9-アントリル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、2-ビフェニル基、3-ビフェニル基、4-ビフェニル基、*p*-ターフェニル-4-イル基、*p*-ターフェニル-3-イル基、*p*-ターフェニル-2-イル基、*m*-ターフェニル-4-イル基、*m*-ターフェニル-3-イル基、*m*-ターフェニル-2-イル基、*o*-トリル基、*m*-トリル基、*p*-トリル基、*p*-*t*-ブチル

フェニル基、p-(2-フェニルプロピル)フェニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、4-メチル-1-アントリル基、4'-メチルビフェニル基、4''-t-ブチル-p-ターフェニル-4-イル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベンゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、2-キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノリル基、4-イソキノリル基、5-イソキノリル基、6-イソキノリル基、7-イソキノリル基、8-イソキノリル基、2-キノキサリニル基、5-キノキサリニル基、6-キノキサリニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、1-フェナンスリジニル基、2-フェナンスリジニル基、3-フェナンスリジニル基、4-フェナンスリジニル基、6-フェナンスリジニル基、7-フェナンスリジニル基、8-フェナンスリジニル基、9-フェナンスリジニル基、10-フェナンスリジニル基、1-アクリジニル基、2-アクリジニル基、3-アクリジニル基、4-アクリジニル基、9-アクリジニル基、1, 7-フェナンスロリン-2-イル基、1, 7-フェナンスロリン-3-イル基、1, 7-フェナンスロリン-4-イル基、1, 7-フェナンスロリン-5-イル基、1, 7-フェナンスロリン-6-イル基、1, 7-フェナンスロリン-8-イル基、1, 7-フェナンスロリン-9-イル基、

1, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1, 8-フェナンスロリン-2-イル基、1, 8-フェナンスロリン-3-イル基、1, 8-フェナンスロリン-4-イル基、1, 8-フェナンスロリン-5-イル基、1, 8-フェナンスロリン-6-イル基、1, 8-フェナンスロリン-7-イル基、1, 8-フェナンスロリン-9-イル基、1, 8-フェナンスロリン-10-イル基、1, 9-フェナンスロリン-2-イル基、1, 9-フェナンスロリン-3-イル基、1, 9-フェナンスロリン-4-イル基、1, 9-フェナンスロリン-5-イル基、1, 9-フェナンスロリン-6-イル基、1, 9-フェナンスロリン-7-イル基、1, 9-フェナンスロリン-8-イル基、1, 9-フェナンスロリン-10-イル基、1, 10-フェナンスロリン-2-イル基、1, 10-フェナンスロリン-3-イル基、1, 10-フェナンスロリン-4-イル基、1, 10-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-1-イル基、2, 9-フェナンスロリン-3-イル基、2, 9-フェナンスロリン-4-イル基、2, 9-フェナンスロリン-5-イル基、2, 9-フェナンスロリン-6-イル基、2, 9-フェナンスロリン-7-イル基、2, 9-フェナンスロリン-8-イル基、2, 9-フェナンスロリン-10-イル基、2, 8-フェナンスロリン-1-イル基、2, 8-フェナンスロリン-3-イル基、2, 8-フェナンスロリン-4-イル基、2, 8-フェナンスロリン-5-イル基、2, 8-フェナンスロリン-6-イル基、2, 8-フェナンスロリン-7-イル基、2, 8-フェナンスロリン-9-イル基、2, 8-フェナンスロリン-10-イル基、2, 7-フェナンスロリン-1-イル基、2, 7-フェナンスロリン-3-イル基、2, 7-フェナンスロリン-4-イル基、2, 7-フェナンスロリン-5-イル基、2, 7-フェナンスロリン-6-イル基、2, 7-フェナンスロリン-8-イル基、2, 7-フェナンスロリン-9-イル基、2, 7-フェナンスロリン-10-イル基、1-フェナジニル基、2-フェナジニル基、1-フェノチアジニル基、2-フェノチアジニル基、3-フェノチアジニル基、4-フェノチアジニル基、1-フ

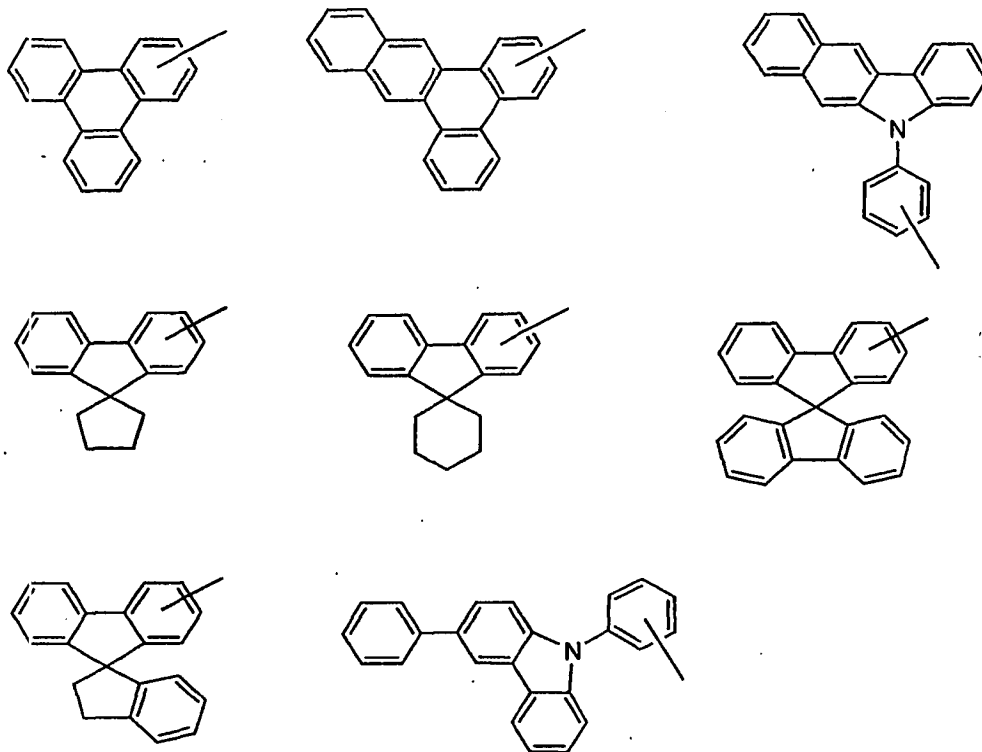
フェノキサジニル基、2-フェノキサジニル基、3-フェノキサジニル基、4-フェノキサジニル基、2-オキサゾリル基、4-オキサゾリル基、5-オキサゾリル基、2-オキサジアゾリル基、5-オキサジアゾリル基、3-フラザニル基、2-チエニル基、3-チエニル基、2-メチルピロール-1-イル基、2-メチルピロール-3-イル基、2-メチルピロール-4-イル基、2-メチルピロール-5-イル基、3-メチルピロール-1-イル基、3-メチルピロール-2-イル基、3-メチルピロール-4-イル基、3-メチルピロール-5-イル基、2-teeブチルピロール-4-イル基、3-(2-フェニルプロピル)ピロール-1-イル基、2-メチル-1-インドリル基、4-メチル-1-インドリル基、2-メチル-3-インドリル基、4-メチル-3-インドリル基、2-teeブチル1-インドリル基、4-teeブチル1-インドリル基、2-teeブチル3-インドリル基、4-teeブチル3-インドリル基等が挙げられる。

R₁ 及び R₂ の置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルコキシカルボニル基は -COOY と表され、Y の例としてはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、teeブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシteeブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロエチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロteeブチル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモteeブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2

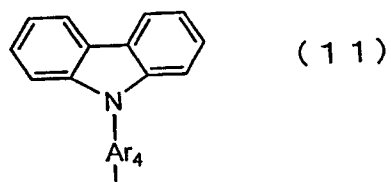
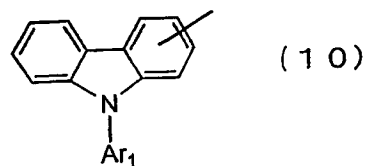
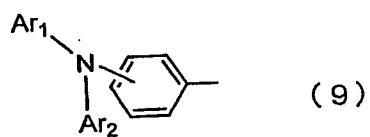
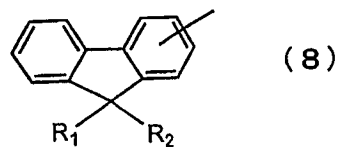
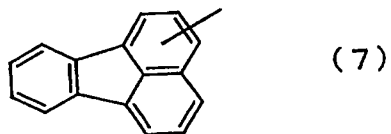
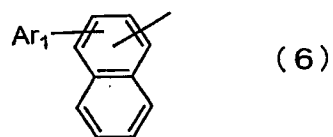
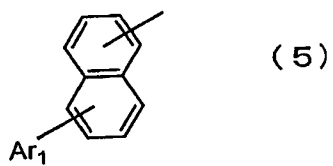
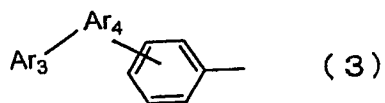
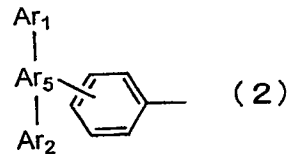
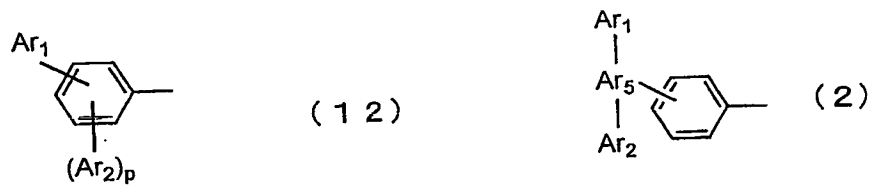
ージョードエチル基、1, 3-ジオードイソプロピル基、2, 3-ジオード-
 ーブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノ
 エチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエ
 チル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノ-
 ーブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2
 -シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1,
 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノ-
 ーブチル基、1, 2, 3-
 トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチ
 ル基、2-ニトロイソブチル基、1, 2-ジニトロエチル基、1, 3-ジニトロ
 イソプロピル基、2, 3-ジニトロ-
 ーブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロ
 ピル基等が挙げられる。

R₁ 及び R₂ の置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 40 のシリル基の例としては
 、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリプロピルシリル基、トリブチ
 ルシリル基、トリペンチルシリル基、トリヘキシルシリル基、
 ーブチルジメチ
 ルシリル基等のトリアルキルシリル基の他、ジアルキルアリールシリル基、アル
 キルジアリールシリル基、トリアリールシリル基等が挙げられ、アルキル基及び
 アリール基としては、前記と同様のものが挙げられる。

A r₁ と A r₂ 及び R₁ と R₂ が互いに結合し環状構造を形成する場合の例と
 しては、下記のような構造が挙げられる。



上記一般式 (B) において、A' は、下記一般式 (2) ~ (12) から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されていてもよい。但し、B がアリールアミノ基で置換されている場合は、A' はアリールアミノ基で置換されたフェニル基ではない。



(2) ~ (12) 式中、 $Ar_1 \sim Ar_3$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 6 ~ 30 のアリール基、 Ar_4 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、 Ar_5 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ~ 30 の 3 価の芳香族残基である。 R_1 及び R_2 は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、

ヒドロキシル基、置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 40 のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 40 のアリーロキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ～ 40 のシリル基、又はカルボキシル基である。また、 Ar_1 と Ar_2 及び R_1 と R_2 は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。式 (12) の p は、0 又は 1 である。

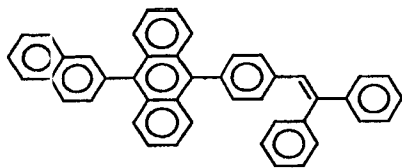
一般式 (B) の (2) ～ (12) 式における $Ar_1 \sim Ar_5$ 、 R_1 及び R_2 の具体例は、一般式 (A) の (1) ～ (11) 式における $Ar_1 \sim Ar_5$ 、 R_1 及び R_2 と同様である。

一般式 (A) 及び (B) の各基における置換基の例としては、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、置換もしくは無置換アミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルケニル基、置換もしくは無置換のシクロアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、置換もしくは無置換のアラルキル基、置換もしくは無置換のアリーロキシ基、置換もしくは無置換のアルコシカルボニル基、カルボキシル基等が挙げられる。

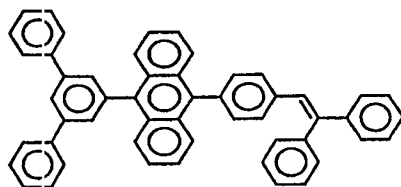
また、一般式 (A) における式 (1) ～ (11)、及び一般式 (B) における式 (2) ～ (12) は、それぞれ独立に、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、又は炭素数 5 ～ 30 のシクロアルキル基で置換されていると好ましい。

本発明の一般式 (A) 及び (B) で表される新規芳香族化合物の具体例を以下に示すが、これら例示化合物に限定されるものではない。

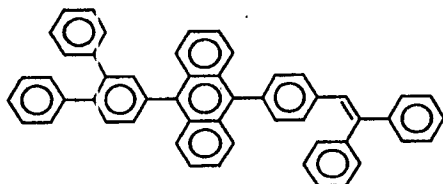
(A 1)



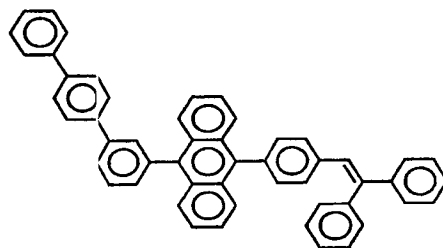
(A 2)



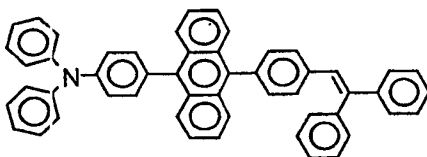
(A 3)



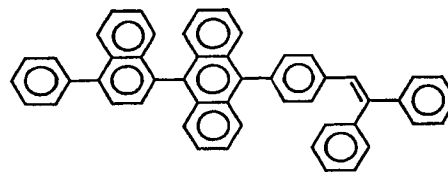
(A 4)



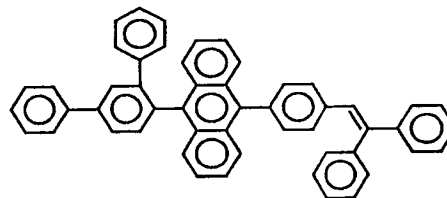
(A 5)



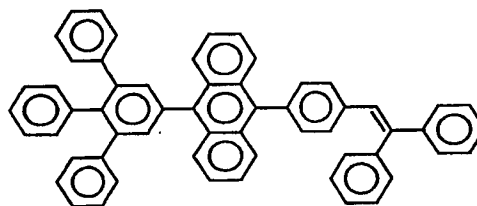
(A 6)



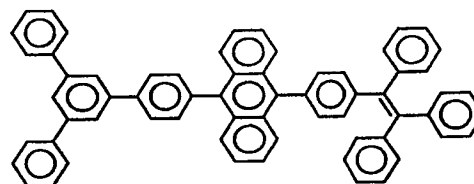
(A 7)



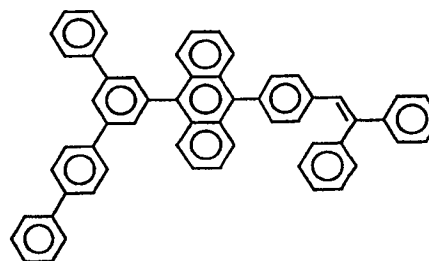
(A 8)



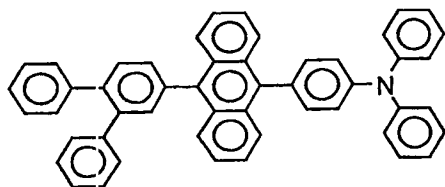
(A 9)



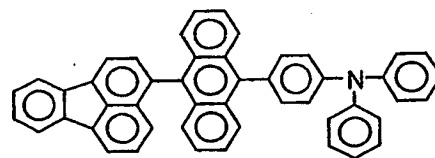
(A 10)



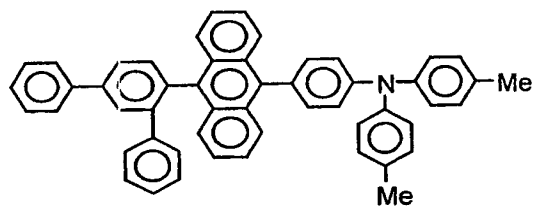
(A11)



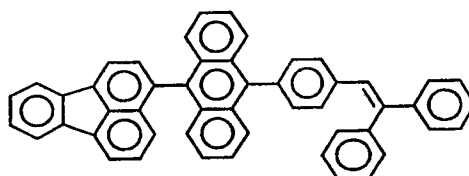
(A16)



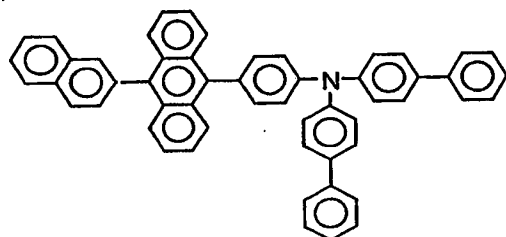
(A12)



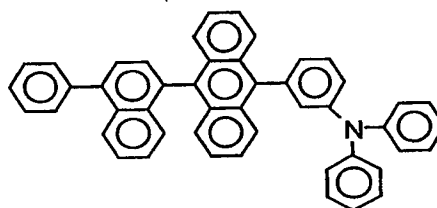
(A17)



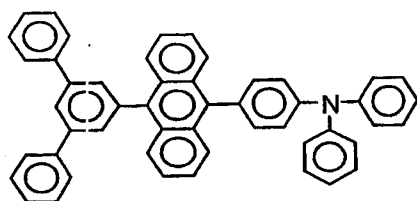
(A13)



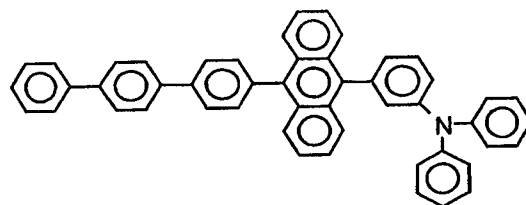
(A18)



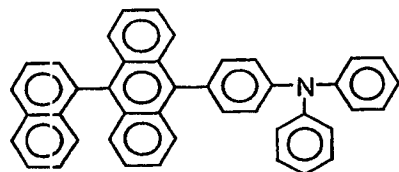
(A14)



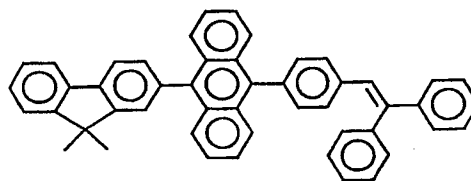
(A19)



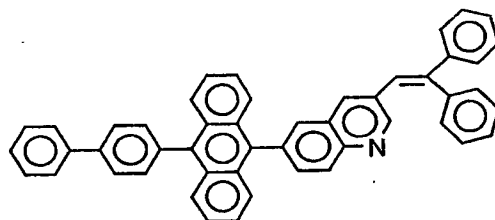
(A15)



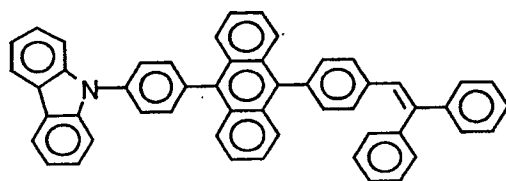
(A20)



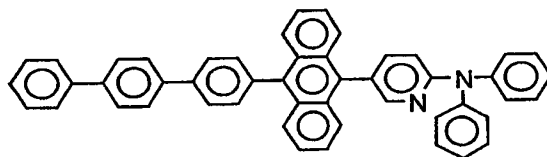
(A21)



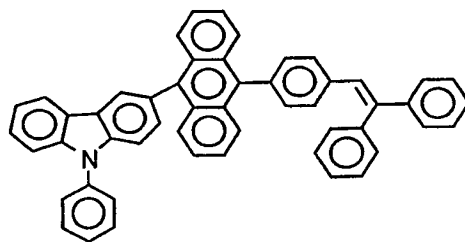
(A22)



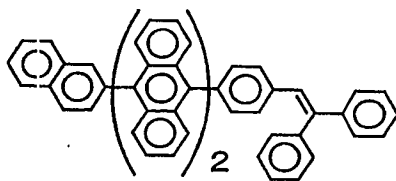
(A23)



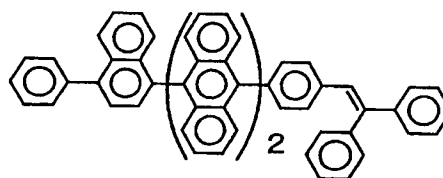
(A24)



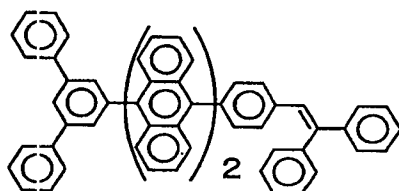
(B 1)



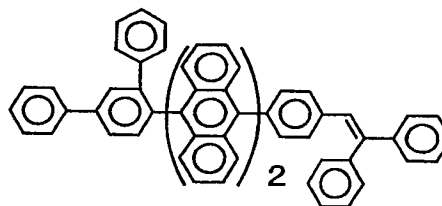
(B 6)



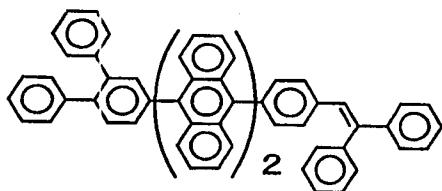
(B 2)



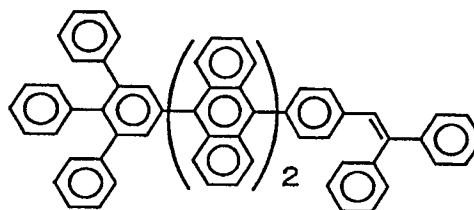
(B 7)



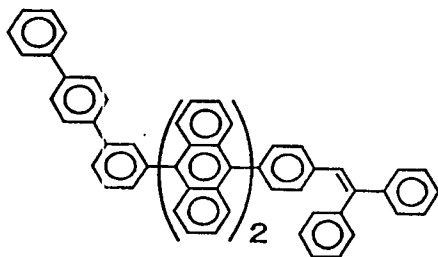
(B 3)



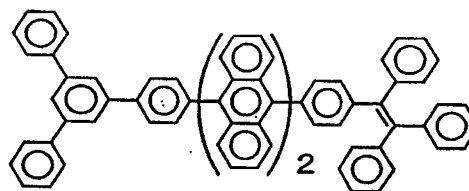
(B 8)



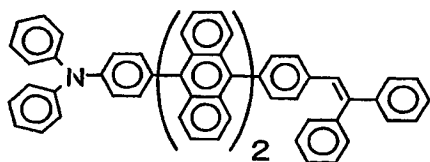
(B 4)



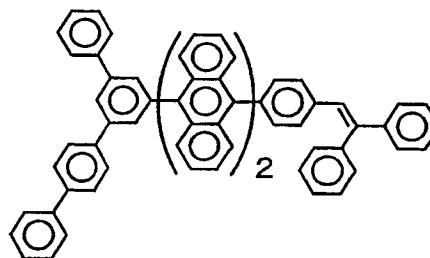
(B 9)



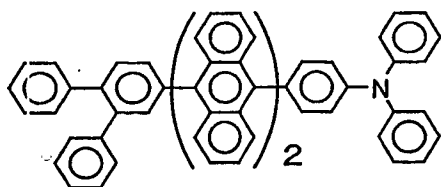
(B 5)



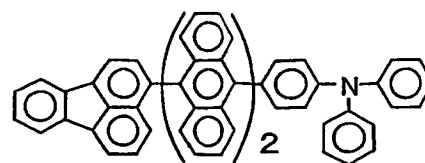
(B 10)



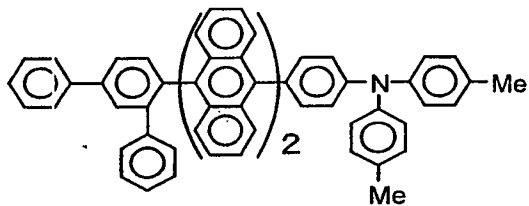
(B11)



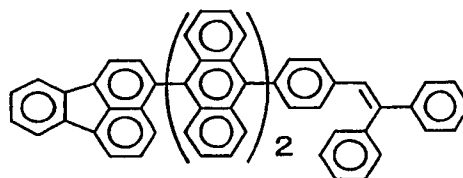
(B16)



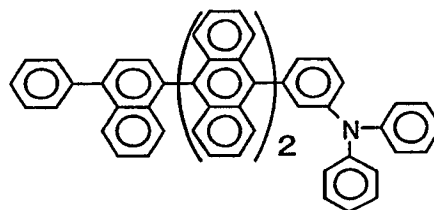
(B12)



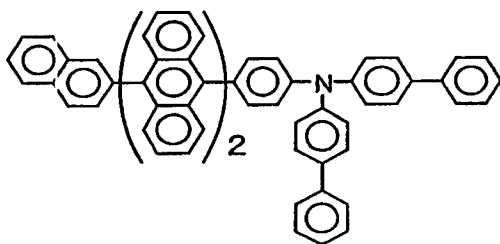
(B17)



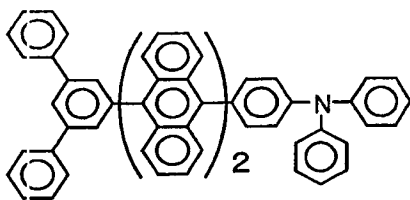
(B18)



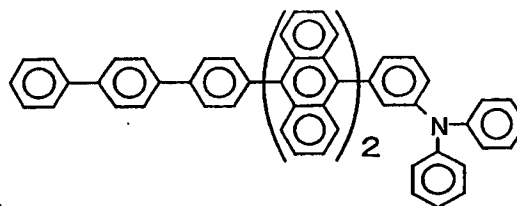
(B13)



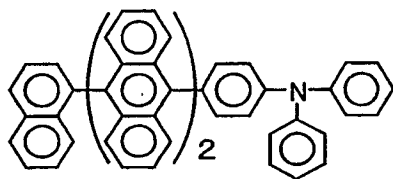
(B14)



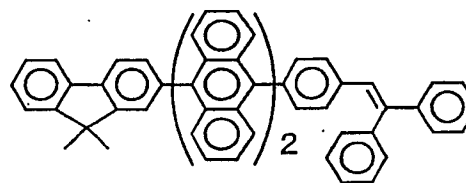
(B19)



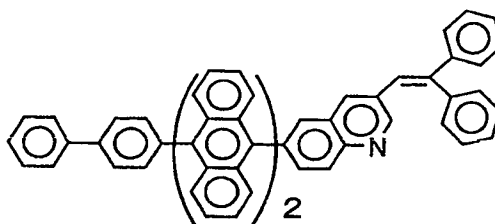
(B15)



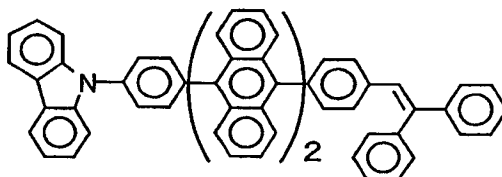
(B20)



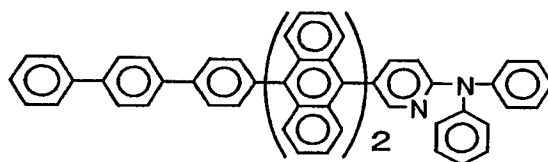
(B21)



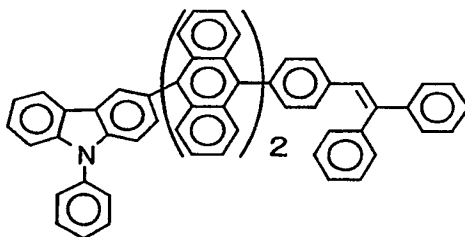
(B22)



(B23)



(B24)



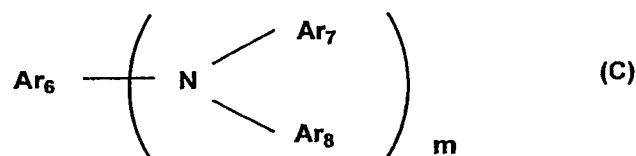
本発明の上記一般式（A）及び（B）の芳香族化合物は、有機EL素子用材料として使用することが好ましい。

本発明の有機EL素子は、陰極と陽極間に少なくとも発光層を含む一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機エレクトロルミネッセンス素子において、該有機薄膜層の少なくとも1層が、前記一般式（A）又は（B）の芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有する。

前記有機薄膜層が、電子輸送層及び／又は正孔輸送層を有し、該電子輸送層及び／又は正孔輸送層が、前記一般式（A）又は（B）の芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有すると好ましい。

また、前記発光層が、さらにアリールアミン化合物及び／又はスチリルアミン化合物を含有すると好ましい。

アリールアミン化合物としては、下記一般式（C）で表されるアリールアミン化合物が好ましい。



（式中、 Ar_6 は、炭素数が6～40の芳香族基であり、 Ar_7 及び Ar_8 は、それぞれ独立に、水素原子又は炭素数が6～20の芳香族基である。 m は1～4の整数である。）

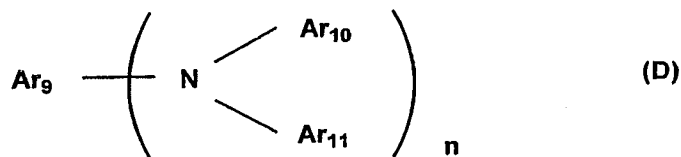
Ar_6 の炭素数が6～40の芳香族基のうち、好ましい核原子数6～40のアリール基としては、フェニル、ナフチル、アントラニル、フェナンスリル、ピレニル、コロニル、ビフェニル、ターフェニル、ピローリル、フラニル、チオフェニル、ベンゾチオフェニル、オキサジアゾリル、ジフェニルアントラニル、インドリル、カルバゾリル、ピリジル、ベンゾキノリル、フルオランテニル、アセナフトフルオランテニル等が挙げられる。また、好ましい核原子数6～40のアリーレン基としては、フェニレン、ナフチレン、アントラニレン、フェナンスリレン、ピレニレン、コロニレン、ビフェニレン、ターフェニレン、ピローリレン、フラニレン、チオフェニレン、ベンゾチオフェニレン、オキサジアゾリレン、ジフェニルアントラニレン、インドリレン、カルバゾリレン、ピリジレン、ベンゾキノリレン、フルオランテニレン、アセナフトフルオランテニレン等が挙げられる。

なお、炭素数が6～40の芳香族基は、さらに置換基により置換されていてもよく、好ましい置換基としては、炭素数1～6のアルキル基（エチル基、メチル基、i-プロピル基、n-プロピル基、s-ブチル基、t-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等）、炭素数1～6のアルコキシ基（エトキシ基、メトキシ基、i-プロポキシ基、n-プロポキシ基、s-ブトキシ基、t-ブトキシ基、ペントキシ基、ヘキシルオキシ基、シクロペントキシ基、シクロヘキシルオキシ基等）、核原子数6～40のアリール基、核原子数6～40のアリール基で置換されたアミノ基、核原子数6～40のアリール基を有するエステル基、炭素数1～6のアルキル基を有するエステル基、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子が挙げられる。

また、 Ar_7 及び Ar_8 の炭素数が6～20の芳香族基としては、 Ar_6 の炭素数が6～40の芳香族基のうち炭素数が6～20のものが挙げられる。

前記アリールアミン化合物の例としては、トリフェニルアミン、ジフェニルナフチルアミン、ジフェニルピレニルアミン等が挙げられる。

スチリルアミン化合物としては、下記一般式（D）で表されるスチリルアミン化合物が好ましい。



（式中、 Ar_9 は、フェニレン、ビフェニレン、ターフェニレン、スチルベンジスチリルアリーレンよりなる2価の基であり、 Ar_{10} 及び Ar_{11} は、それぞれ独立に、水素原子又は炭素数が6～30の芳香族基であり、 Ar_9 、 Ar_{10} 及び Ar_{11} は置換されいてもよく、 Ar_{10} 及び Ar_{11} の少なくとも一方がスチリル基で置換されている。 n は、1～4の整数である。）

Ar_9 、 Ar_{10} 及び Ar_{11} の置換基としては、前記一般式（C）の Ar_6 で挙

げたものと同様のものが挙げられる。

本発明における有機EL素子の素子構造の具体例としては、電極間に有機薄膜層を1層あるいは2層以上積層した構造であり、（陽極、発光層、陰極）、（陽極、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、陰極）、（陽極、正孔輸送層、発光層、陰極）、（陽極、発光層、電子輸送層、陰極）等の構造が挙げられる。本発明における芳香族化合物は上記のどの有機薄膜層に用いられてもよく、他の正孔輸送材料、発光材料、電子輸送材料にドーピングさせることも可能である。

また、本発明の有機EL素子の好ましい形態に、電子を輸送する領域又は陰極と有機薄膜層の界面領域に、還元性ドーパントを含有する素子がある。ここで、還元性ドーパントとは、電子輸送性化合物を還元ができる物質と定義される。したがって、一定の還元性を有するものであれば、様々なものが用いられ、例えば、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物または希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属の有機錯体、アルカリ土類金属の有機錯体、希土類金属の有機錯体からなる群から選択される少なくとも一つの物質を好適に使用することができる。

好ましい還元性ドーパントとしては、Na（仕事関数：2.36 eV）、K（仕事関数：2.28 eV）、Rb（仕事関数：2.16 eV）およびCs（仕事関数：1.95 eV）からなる群から選択される少なくとも一つのアルカリ金属や、Ca（仕事関数：2.9 eV）、Sr（仕事関数：2.0～2.5 eV）、及びBa（仕事関数：2.52 eV）からなる群から選択される少なくとも一つのアルカリ土類金属が挙げられ、仕事関数が2.9 eV以下のものが特に好ましい。これらのうち、より好ましい還元性ドーパントは、K、Rb及びCsからなる群から選択される少なくとも一つのアルカリ金属であり、さらに好ましくは、Rb又はCsであり、最も好ましいのは、Csである。これらのアルカリ金属は、特に還元能力が高く、電子注入域への比較的少量の添加により、有機EL素子に

おける発光輝度の向上や長寿命化が図られる。また、仕事関数が 2.9 eV 以下の還元性ドーパントとして、これら2種以上のアルカリ金属の組み合わせも好ましく、特に、Csを含んだ組み合わせ、例えば、CsとNa、CsとK、CsとRbあるいはCsとNaとKとの組み合わせであることが好ましい。Csを組み合わせることで、還元能力を効率的に発揮することができ、電子注入域への添加により、有機EL素子における発光輝度の向上や長寿命化が図られる。

本発明の有機EL素子は、陰極と有機薄膜層の間に絶縁体や半導体で構成される電子注入層をさらに設けても良い。この時、電流のリークを有効に防止して、電子注入性を向上させることができる。このような絶縁体としては、アルカリ金属カルコゲナイド、アルカリ土類金属カルコゲナイド、アルカリ金属のハロゲン化物及びアルカリ土類金属のハロゲン化物からなる群から選択される少なくとも一つの金属化合物を使用するのが好ましい。電子注入層がこれらのアルカリ金属カルコゲナイド等で構成されていれば、電子注入性をさらに向上させることができる点で好ましい。具体的に、好ましいアルカリ金属カルコゲナイドとしては、例えば、 Li_2O 、 LiO 、 Na_2S 、 Na_2Se 、 NaO 等が挙げられ、好ましいアルカリ土類金属カルコゲナイドとしては、例えば、 CaO 、 BaO 、 SrO 、 BeO 、 BaS 、 CaSe が挙げられる。また、好ましいアルカリ金属のハロゲン化物としては、例えば、 LiF 、 NaF 、 KF 、 LiCl 、 KCl 、 NaCl 等が挙げられる。また、好ましいアルカリ土類金属のハロゲン化物としては、例えば、 CaF_2 、 BaF_2 、 SrF_2 、 MgF_2 、 BeF_2 等のフッ化物や、フッ化物以外のハロゲン化物が挙げられる。

電子輸送層を構成する半導体としては、Ba、Ca、Sr、Yb、Al、Ga、In、Li、Na、Cd、Mg、Si、Ta、Sb及びZnの少なくとも一つの元素を含む酸化物、窒化物又は酸化窒化物等の一種単独又は二種以上の組み合わせが挙げられる。また、電子輸送層を構成する無機化合物が、微結晶又は非晶質の絶縁性薄膜であることが好ましい。電子輸送層がこれらの絶縁性薄膜で構成

されていれば、より均質な薄膜が形成されるために、ダークスポット等の画素欠陥を減少させることができる。なお、このような無機化合物としては、上述したアルカリ金属カルコゲナイド、アルカリ土壌金属カルコゲナイド、アルカリ金属のハロゲン化物およびアルカリ土壌金属のハロゲン化物等が挙げられる。

本発明の有機EL素子の陽極は、正孔を正孔輸送層又は発光層に注入する役割を担うものであり、4.5 eV以上の仕事関数を有することが効果的である。本発明に用いられる陽極材料の具体例としては、酸化インジウム錫合金（ITO）、酸化錫（NE SA）、金、銀、白金、銅等が適用できる。また陰極としては、電子輸送層又は発光層に電子を注入する目的で、仕事関数の小さい材料が好ましい。

本発明の有機EL素子の各層の形成方法は特に限定されず、従来公知の真空蒸着法、スピンコーティング法等による形成方法を用いることができる。本発明の有機EL素子に用いる、前記一般式（A）又は（B）で表される化合物を含有する有機薄膜層は、真空蒸着法、分子線蒸着法（MBE法）あるいは溶媒に溶解した溶液のディッピング法、スピンコーティング法、キャスト法、バーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。

本発明の有機EL素子の各有機薄膜層の膜厚は特に制限されないが、一般に膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、逆に厚すぎると高い印加電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常は数nmから1 μ mの範囲が好ましい。

以上のように、有機EL素子の有機薄膜層に本発明の新規芳香族化合物を用いることにより、発光輝度及び発光効率が高く、色純度が高く、青色系に発光し、さらに高温安定性に優れた有機EL素子を得ることができ、この有機EL素子は、例えば電子写真感光体、壁掛けテレビ用フラットパネルディスプレイ等の平面発光体、複写機、プリンター、液晶ディスプレイのバックライト又は計器類等の光源、表示板、標識灯、アクセサリ等に好適に用いられる。

次に、実施例を用いて本発明をさらに詳しく説明するが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。

合成例 1 (化合物 (A 1) の合成)

(1) 9-(2-ナフチル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、9-ブロモアントラセン(3g, 12mmol)、2-ナフタレンボロン酸(2.4g, 14mmol, 1.2eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.28g, 0.24mmol, 2%Pd)をジメトキシエタン(40ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(4.5g, 42mmol, 3eq/20ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体を得た。これを、沸騰ジメトキシエタン(30ml)に懸濁し、放冷後、ろ別、ジメトキシエタン、アセトンで洗浄して灰色固体(82%, crude)を得た。これをショートカラム(シリカゲル/ジクロロメタン)で精製して淡黄色固体(2.7g, 収率 74%)を得た。このものは、¹H-NMRにより9-(2-ナフチル)アントラセンと同定された。

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ 7.2-7.7 (9H, m), 7.8-8.1 (6H, m), 8.51 (1H, s).

(2) 9-ブロモ-10-(2-ナフチル)アントラセンの合成

9-(2-ナフチル)アントラセン(2.7g, 8.9mmol)を無水(N,N-ジメチルホルムアミド)DMF(50ml)に懸濁し、(N-ブロモスクシンイミド)NBS(1.7g, 9.6mmol, 1.1eq)の無水DMF溶液(6ml)を加えて、室温で10時間攪拌し、一晩放置した。反応混合物を水(50ml)で希釈し、固体をろ別、メタノールで洗浄して淡黄色固体(3.2g, 収率 94%)を得た。このものは、¹H-NMRにより9-ブロモ-10-(2-ナフチル)アントラセンと同定された。

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ 7.2-7.7 (9H, m), 7.8-8.1 (4H, m), 8.62 (2H, d, J=8Hz).

(3) 9-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)-10-(2-ナフチル)アントラセン(化合物(A 1))の合成

Ar雰囲気下、9-ブロモ-10-(2-ナフチル)アントラセン(3.2g, 8.4mmol)、4-

(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸(2.8g, 9.3mmol, 1.1eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.19g, 0.16mmol, 2%Pd)をトルエン(30ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(3g, 28mmol, 3eq/15ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、トルエン、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体(3.7g)を得た。これを沸騰トルエン(40ml)に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体(3.4g, 収率 73%)を得た。このものの¹H-NMRの測定結果は以下のものであった。

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ 7.15 (1H, s), 7.2-7.4 (17H, m), 7.5-7.8 (8H, m), 7.8-8.1 (4H, m).

さらに、得られた固体(3.4g)を340 °C/10⁻⁶Torrで1時間昇華精製することにより淡黄色固体(2.9g)を得た。このものは、FDMS(フィールドディソープシオンマス分析)により目的物(A1)であることを確認した。また、エネルギーギャップE_g、イオンポテンシャルI_p及びガラス転移温度T_gの測定結果を以下に示す。

FDMS, calcd for C₄₄H₃₀=558, found m/z=558 (M⁺, 100).

λ_{max}, 397, 378, 359nm (PhMe)

F_{max}, 438nm (PhMe, λ_{ex}=397nm)

I_p=5.71eV (100nW, 27Y/eV)

T_g=108°C.

合成例2(化合物(A2)の合成)

(1) 9-(3,5-ジブロモフェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、9-ヨードアントラセン(8.7g, 29mmol, 1.1eq)、3,5-ジブロモフェニルボロン酸(7.3g, 26mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.67g, 0.58mmol, 2%Pd)をトルエン(80ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(8.3g, 78mmol, 3eq/40ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をから有機層を分取、飽和食塩水で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して黄色固

体を得た。これをジクロロメタン(20ml)に懸濁し、固体をろ別して、ジクロロメタン+ヘキサンで洗浄して淡黄色固体(5.1g, 収率 48%, 1st crop)を得た。ろ液をカラムクロマトグラフィ(シリカゲル/ヘキサン、ヘキサン+5% ジクロロメタン)で精製して淡黄色固体(4.2g, 収率 39%, 2nd crop)を得た。合計、淡黄色固体(9.3g, 収率 87%)を得た。このものは、¹H-NMRにより9-(3,4-ジブロモフェニル)アントラセンと同定された。

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ 7.3-7.6 (8H, m), 7.85 (1H, t, J=2Hz), 8.0-8.1 (2H, m), 8.49 (1H, s).

(2) 9-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、9-(3,5-ジブロモフェニル)アントラセン(5g, 12mmol)、フェニルボロン酸(4.4g, 36mmol, 3eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.55g, 0.48mmol, 2%Pd)をトルエン(100ml)に溶かし、2M炭酸ナトリウム水溶液(11g, 0.10mol, 3eq/50ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、ろ液から有機層を分取、飽和食塩水(50ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して黒色オイルを得た。これをカラムクロマトグラフィ(シリカゲル/ヘキサン、ヘキサン+3% ジクロロメタン、最後にヘキサン+10% ジクロロメタン)で精製して淡黄色アモルファス固体(3.6g, 74%)を得た。このものは、

¹H-NMR及びFDMSにより9-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセンと同定された。

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ 7.3-7.6 (10H, m), 7.7-7.9 (8H, m), 8.01 (1H, s), 8.05 (2H, dd, J=9Hz, 2Hz), 8.52 (1H, s).

FDMS, calcd for C₃₂H₂₂=406, found m/z=406 (M⁺, 100).

(3) 9-ブロモ-10-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセンの合成

9-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセン(3.6g, 8.9mmol)を無水DMF(60ml)に懸濁し、NBS(1.9g, 11mmol, 1.2eq)の無水DMF溶液(7ml)を加えて、室温で10時間攪拌し、一晩放置した。反応混合物を水(50ml)で希釈し、固体を

ろ別、メタノールで洗浄して淡黄色固体(3.9g, 収率 90%)を得た。このものは、¹H-NMRにより9-ブromo-10-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセンと同一と定された。

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ 7.3-7.9 (18H, m), 8.01 (1H, t, J=2Hz), 8.62 (2H, d, J=9Hz).

(4) 9-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)-10-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセン(化合物(A2))の合成

Ar雰囲気化、9-ブromo-10-(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセン(3.9g, 8.0mmol)、4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸(2.7g, 9.0mmol, 1.1eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.18g, 0.16mmol, 2%Pd)をトルエン(30ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(2.9g, 27mmol, 3eq/15ml)を加えて10時間還流した。反応混合物から有機層を分取、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去してかっ色固体を得た。これをカラムクロマトグラフィ(シリカゲル/ヘキサン+10%ジクロロメタン、ヘキサン+20%ジクロロメタン)で精製して白色固体(4.3g, 収率 81%)を得た。このものの¹H-NMRの測定結果は以下のものであった。

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ 7.15(1H, s), 7.2-7.5 (24H, m), 7.7-7.9 (10H, m), 8.02 (1H, t, J=2Hz).

さらに、得られた固体(4.3g)を360 °C/10⁻⁶Torrで1時間昇華精製することにより淡黄色固体(3.2g)を得た。このものは、FDMSにより目的物(A2)であることを確認した。また、Eg、Ip及びTgの測定結果を以下に示す。

FDMS, calcd for C₅₂H₃₈=660, found m/z=660 (M⁺, 100).

λ_{max}, 397, 377, 359nm (PhMe)

F_{max}, 435nm (PhMe, λ_{ex}=397nm)

I_p=5.82eV (100nW, 60Y/eV)

T_g=120°C.

合成例 3 (化合物 (A 3) の合成)

(1) 9-(3,4-ジクロロフェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、3,4-ジクロロフェニルボロン酸(2.7g, 14mmol, 1.1eq)、9-ブromoアントラセン(3.3g, 13mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.3g, 0.26mmol, 2%Pd)をトルエン(40ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(4.5g, 42mmol, 3eq/20ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別してPd黒を除き、ろ液から有機層を分取、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して淡褐色オイルを得た。これに少量のメタノールを加えてフラスコの壁をこすると結晶化したので、ろ別し、メタノールで洗浄して淡黄色固体(3.7g, 収率 88%)を得た。このものは、 $^1\text{H-NMR}$ により9-(3,4-ジクロロフェニル)アントラセンと同定された。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , TMS) δ 7.2-7.7 (9H, m), 8.02 (2H, dd, $J=7\text{Hz}$, 2Hz), 8.48 (1H, s).

(2) 9-(3,4-ジフェニルフェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、フェニルボロン酸(3.6g, 30mmol, 2.7eq)、9-(3,4-ジクロロフェニル)アントラセン(3.7g, 11mmol)、ジクロロビス(トリフェニルホスフィン)ニッケル(II)(0.72g, 1.1mmol, 5%Ni)、トリフェニルホスフィン(0.58g, 2.2mmol, 2eq to Ni)、リン酸カリウム水和物(16g, 60mmol, 2eq)を無水トルエン(80ml)に懸濁し、 80°C で10時間加熱した。反応混合物に水(50ml)を加え、不溶物をろ別した。ろ液から有機層を分取し、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して淡褐色オイルを得た。これをカラムクロマトグラフィ(シリカゲル/ヘキサン+10%ジクロロメタン、ヘキサン+20%ジクロロメタン、最後にヘキサン+30%ジクロロメタン)で精製して白色固体(3.7g, 収率 83%)を得た。このものは、 $^1\text{H-NMR}$ 及び $^{13}\text{C-NMR}$ により9-(3,4-ジフェニルフェニル)アントラセンと同定された。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , TMS) δ 7.1-7.7 (17H, m), 7.8-8.1 (4H, m), 8.49 (1H, s).

FDMS, calcd for $C_{32}H_{22}=406$, found $m/z=406$ (M^+ , 100).

(3) 9-(3,4-ジフェニルフェニル)-10-ブロモアントラセンの合成

9-(3,4-ジフェニルフェニル)アントラセン(3.7g, 9.1mmol)を無水DMF(50ml)に懸濁し、NBS(1.8g, 10mmol, 1.1eq)の無水DMF溶液(10ml)を加えて、50℃で5分間加熱して反応混合物を均一に溶かした。その後、室温で4時間攪拌し、一晩放置した。反応混合物を水(50ml)で希釈し、固体をろ別、メタノールで洗浄して淡黄色固体(4.2g, 収率 95%)を得た。このものは、 1H -NMRにより9-(3,4-ジフェニルフェニル)-10-ブロモアントラセンと同定された。

1H -NMR ($CDCl_3$, TMS) δ 2.2-7.7 (17H, m), 7.85 (2H, d, $J=8Hz$), 8.61 (2H, d, $J=8Hz$).

(4) 9-(3,4-ジフェニルフェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセン(化合物(A3))の合成

Ar雰囲気下、9-(3,4-ジフェニルフェニル)-10-ブロモアントラセン(3.0g, 6.2mmol)、4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸(2.0g, 6.7mmol, 1.1eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.14g, 0.12mmol, 2%Pd)をトルエン(20ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(2.1g, 20mmol, 3eq/10ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体(3.7g)を得た。これを沸騰トルエン(40ml)に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体(3.6g, 収率 88%)を得た。このものの 1H -NMRの測定結果は以下のものであった。

1H -NMR ($CDCl_3$, TMS) δ 0.0-7.9 (36H, m), all-H.

さらに、得られた固体(3.6g)を340℃/10⁻⁶Torrで1時間昇華精製することにより淡黄色固体(2.1g)を得た。このものは、FDMSにより目的物(A3)であることを確認した。また、Eg、Ip及びTgの測定結果を以下に示す。

FDMS, calcd for $C_{52}H_{36}=660$, found $m/z=660$ (M^+ , 100).

λ_{max} , 398, 378, 359nm (PhMe)

F_{max}, 437nm (PhMe, λ_{ex}=398nm)

I_p=5.82eV (100nW, 64Y/eV)

T_g=122°C.

合成例 4 (化合物 (A 4)) の合成

(1) 9-(3-クロロフェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、3-クロロフェニルボロン酸(3.3g, 21mmol, 1.1eq)、9-ブromoアントラセン(5.0g, 19mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.5g, 0.43mmol, 2%Pd)をトルエン(60ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(6.8g, 64mmol, 3eq/35ml)を加えて10時間還流した。反応混合物から有機層を分取、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して黄色オイルを得た。これをカラムクロマトグラフィ(シリカゲル/ヘキサン+5%ジクロロメタン)で精製して淡黄色固体(5.2g, 収率 95%)を得た。このものは、¹H-NMRにより9-(3-クロロフェニル)アントラセンと同定された。

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ .2-7.7 (10H, m), 7.7-7.8 (2H, m), 8.48 (1H, s).

(2) 9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、4-ビフェニルボロン酸(3.6g, 18mmol, 1.3eq)、9-(3-クロロフェニル)アントラセン(4.1g, 14mmol)、ジクロロ(1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン)ニッケル(II)(0.3g, 0.44mmol, 3%Ni)、無水リン酸カリウム(10g, 47mmol, 2.7eq)を無水ジオキサン(70ml)に懸濁し、90°Cで7時間加熱した。反応混合物に水(50ml)とトルエン(100ml)を加え、有機層を分取し、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して淡褐色固体を得た。これを沸騰エタノール(50ml)+トルエン(10ml)に懸濁し、放冷後、ろ別してエタノールで洗浄して白色固体(4.8g, 収率 84%)を得た。このものは、¹H-NMRにより9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)アントラセンと同定された。

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ .3-7.8 (19H, m), 8.03 (2H, d, J=7Hz), 8.49 (1H, s).

(3) 9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)-10-ブロモアントラセンの合成

9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)アントラセン (4.8g, 12mmol) を無水DMF (70ml) に懸濁し、NBS (2.3g, 13mmol, 1.1eq) の無水DMF 溶液 (15ml) を加えて、40℃で15分間加熱して反応混合物を均一に溶かした。その後、室温で7時間攪拌し、一晩放置した。反応混合物を水 (50ml) で希釈し、固体をろ別、メタノールで洗浄して淡黄色固体 (5.2g, 収率 89%) を得た。このものは、¹H-NMR により 9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)-10-ブロモアントラセンと同一と定された。

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ 7.3-7.8 (19H, m), 8.61 (2H, d, J=9Hz).

(4) 9-(3-(4-フェニルフェニル)フェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセン (化合物 (A4)) の合成

Ar雰囲気下、9-(3,4-ジフェニルフェニル)-10-ブロモアントラセン (3.0g, 6.2mmol)、4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸 (2.0g, 6.7mmol, 1.1eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (0.14g, 0.12mmol, 2%Pd) をトルエン (20ml) に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液 (2.1g, 20mmol, 3eq/10ml) を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体を得た。これを沸騰トルエン (30ml) に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体 (3.0g, 収率 73%) を得た。このものの¹H-NMRの測定結果は以下のようであった。

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ 7.15 (1H, s), 7.2-7.4 (22H, m), 7.6-7.8 (13H, m)

さらに、得られた固体 (3.0g) を 340 °C / 10⁻⁶Torr で1時間昇華精製することにより淡黄色固体 (2.6g) を得た。このものは、FDMSにより目的物 (A4) であることを確認した。また、Eg、Ip及びTgの測定結果を以下に示す。

FDMS, calcd for C₅₂H₃₆=660, found m/z=660 (M⁺, 100).

λ_{max}, 397, 377, 358nm (PhMe)

λ_{max} , 434nm (PhMe, λ_{ex} =397nm)

I_p =5.88eV (100nW, 82Y/eV)

T_g =115°C.

合成例 5 (化合物 (A 5)) の合成

(1) 9-(4-クロロフェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、4-クロロフェニルボロン酸(5.0g, 32mmol, 1.1eq)、9-ブロモアントラセン(7.5g, 29mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.7g, 0.61mmol, 2%Pd)をトルエン(100ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(10g, 94mmol, 3eq/50ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別してPd黒を除き、ろ液から有機層を分取、飽和食塩水(30ml)で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥、溶媒留去して白色固体を得た。これを沸騰エタノール(50ml)に懸濁し、放冷後ろ別、エタノールで洗浄して白色固体(7.7g, 収率 92%)を得た。このものは、 $^1\text{H-NMR}$ により9-(4-クロロフェニル)アントラセンと同定された。 $^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , TMS) δ 7.2-7.7 (10H, m), 8.02 (2H, dd, $J=7\text{Hz}$, 2Hz), 8.48 (1H, s).

(2) 9-(4-クロロフェニル)-10-ブロモアントラセンの合成

9-(4-クロロフェニル)アントラセン(4.0g, 14mmol)を無水DMF(60ml)に懸濁し、NBS(2.5g, 14mmol, 1eq)の無水DMF溶液(10ml)を加えて、室温で7時間攪拌し、一晩放置した。反応混合物を水(70ml)で希釈し、固体をろ別、メタノールで洗浄して淡黄色固体(4.6g, 収率 89%)を得た。このものは、 $^1\text{H-NMR}$ により9-(4-クロロフェニル)-10-ブロモアントラセンと同定された。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , TMS) δ 7.3-7.7 (10H, m), 8.60 (2H, d, $J=9\text{Hz}$).

(3) 9-(4-クロロフェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセンの合成

Ar雰囲気下、9-(4-クロロフェニル)-10-ブロモアントラセン(2.0g, 5.4mmol)、4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸(1.8g, 6.0mmol, 1.1eq)、テ

トラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム(0) (0.12g, 0.10mmol, 2%Pd) をトルエン(20ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(1.9g, 18mmol, 3eq/10ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体(2.4g, 収率 82%)を得た。このものは、 $^1\text{H-NMR}$ により9-(4-クロロフェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセンと同定された。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , TMS) δ 7.14 (1H, s), 7.2-7.4 (20H, m), 7.5-7.7 (6H, m).

(4) 9-(4-ジフェニルアミノフェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセン(化合物(A5))の合成

Ar雰囲気化、9-(4-クロロフェニル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセン(2.4g, 4.4mmol)、ジフェニルアミン(0.9g, 5.3mmol, 1.2eq)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) (0.1g, 0.11mmol, 5%Pd)、トリ-*t*-ブチルホスフィン/トルエン溶液(66wt%, 0.05ml, 0.16mmol, 0.7eq to Pd)、ナトリウム-*t*-ブトキシド(0.6g, 6.3mmol, 1.4eq)を無水トルエン(20ml)に懸濁し、8時間還流した。反応混合物をろ別し、トルエン、水、メタノールで洗浄して緑色固体を得た。これを沸騰トルエン(40ml)に懸濁し、放冷後、ろ別して緑色固体(2.4g, 81%)を得た。このものの $^1\text{H-NMR}$ の測定結果は以下のようであった。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , TMS) δ 7.0-7.4 (33H, m), 7.6-7.9 (4H, m).

さらに、得られた固体(2.4g)を360 °C/10⁻⁶Torrで1時間昇華精製することにより淡黄色固体(1.9g)を得た。このものは、FDMSにより目的物(A3)であることを確認した。また、Eg、Ip及びTgの測定結果を以下に示す。

FDMS, calcd for $\text{C}_{52}\text{H}_{37}\text{N}$ =675, found m/z =675 (M⁺, 100).

λ_{max} , 398, 379, 360, 307nm (PhMe)

Fmax, 457nm (PhMe, λ_{ex} =398nm)

Ip=5.73eV (200nW, 16Y/eV)

T_g=114°C.

合成例 6 (化合物 (A 1 1)) の合成

9-(4-ジフェニルアミノフェニル)-10-(3,4-ジフェニルフェニル) アントラセン (化合物 (A 1 1)) の合成

Ar 雰囲気化、9-(4-クロロフェニル)-10-(3,4-ジフェニルフェニル) アントラセン (2.3g, 4.4mmol)、ジフェニルアミン (0.9g, 5.3mmol, 1.2eq)、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (0.1g, 0.11mmol, 5%Pd)、トリ-*t*-ブチルホスフィン/トルエン溶液 (66wt%, 0.05ml, 0.16mmol, 0.7eq to Pd)、ナトリウム-*t*-ブトキシド (0.6g, 6.3mmol, 1.4eq) を無水トルエン (20ml) に懸濁し、8 時間還流した。反応混合物をろ別し、トルエン、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体を得た。これを沸騰トルエン (40ml) に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体 (2.2g, 収率 78%) を得た。このものは、¹H-NMR 及び F D M S により化合物 (A 1 1) であることを確認した。

合成例 7 (化合物 (A 1 4)) の合成

9-(4-ジフェニルアミノフェニル)-10-(3,5-ジフェニルフェニル) アントラセン (化合物 (A 1 4)) の合成

Ar 雰囲気化、9-(4-クロロフェニル)-10-(3,5-ジフェニルフェニル) アントラセン (2.3g, 4.4mmol)、ジフェニルアミン (0.9g, 5.3mmol, 1.2eq)、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (0.1g, 0.11mmol, 5%Pd)、トリ-*t*-ブチルホスフィン/トルエン溶液 (66wt%, 0.05ml, 0.16mmol, 0.7eq to Pd)、ナトリウム-*t*-ブトキシド (0.6g, 6.3mmol, 1.4eq) を無水トルエン (20ml) に懸濁し、8 時間還流した。反応混合物をろ別し、トルエン、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体を得た。これを沸騰トルエン (40ml) に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体 (2.5g, 収率 86%) を得た。このものは、¹H-NMR 及び F D M S により化合物 (A 1 4) であることを確認した。

合成例 8 (化合物 (A 2 0)) の合成

9-(9,9-ジメチルフルオレン-2-イル)-10-(4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル)アントラセン(化合物(A20))の合成

Ar雰囲気下、9-(9,9-ジメチルフルオレン-2-イル)-10-ブロモアントラセン(2.8g, 6.2mmol)、4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニルボロン酸(2.0g, 6.7mmol, 1.1eq)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.14g, 0.12mmol, 2%Pd)をトルエン(20ml)に懸濁し、2M炭酸ナトリウム水溶液(2.1g, 20mmol, 3eq/10ml)を加えて10時間還流した。反応混合物をろ別し、水、メタノールで洗浄して淡黄色固体を得た。これを沸騰トルエン(30ml)に懸濁し、放冷後、ろ別して淡黄色固体(3.0g, 収率 78%)を得た。このものは、¹H-NMR及びFDM Sにより化合物(A20)であることを確認した。

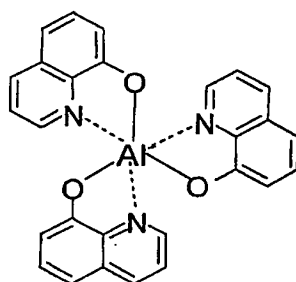
実施例 1

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極付きガラス基板(ジオマテック社製)をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に前記透明電極を覆うようにして膜厚60nmのN,N'-ビス(N,N'-ジフェニル-4-アミノフェニル)-N,N'-β-ナフチル-4,4'-ジアミノ-1,1'-ビフェニル膜(TPD232膜)を成膜した。このTPD232膜は、正孔注入層として機能する。続けて、このTPD232膜上に膜厚20nmのN,N,N',N'-テトラキス(4-ビフェニル)-4,4'-ベンジジン膜(BPTPD膜)を成膜した。このBPTPD膜は正孔輸送層として機能する。さらに、BPTPD膜上に膜厚40nmの上記化合物(A1)を蒸着し成膜した。この膜は、発光層として機能する。この膜上に膜厚10nmの下記Alq膜を成膜した。このAlq膜は、電子注入層として機能する。この後還元性ドーパントであるLi(Li源:サエスゲッター社製)とAlqを二元蒸着させ、電子注入層(陰極)としてAlq:Li膜(膜厚10nm)を形成した。この

A1q:Li膜上に金属Alを蒸着させ金属陰極を形成し有機EL素子を形成した。

この素子は直流電圧6Vで発光輝度176cd/m²、発光効率2.2cd/Aの青色発光が得られた。

さらにこの素子を封止後、100℃の恒温槽に500時間放置した後、倍率20倍の実体顕微鏡によって発光面に輝点又は色の変化が生じているなどで欠陥が生じているかを観察し評価する高温保存試験を行った。以上の結果を表1に示す。



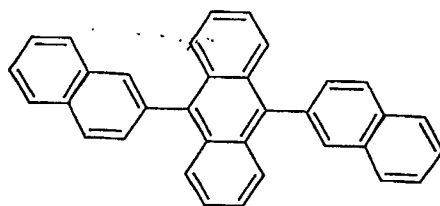
A1q

実施例2～10

実施例1において、化合物(A1)の代わりに表1に記載した化合物を用いた以外は同様にして有機EL素子を作製した。これらの素子の電圧、発光輝度、発光効率、発光色、化合物のガラス転移温度T_g及び高温保存試験結果を表1に示した。

比較例1

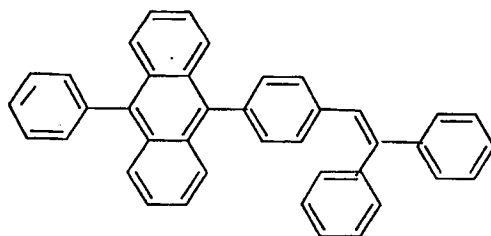
実施例1において、化合物(A1)の代わりに米国特許第5935721号明細書に記載のアリールアントラセン化合物である下記(C1)を用いた以外は同様にして有機EL素子を作製した。この素子の電圧、発光輝度、発光効率、発光色、化合物のガラス転移温度T_g及び高温保存試験結果を表1に示した。



(C1)

比較例 2

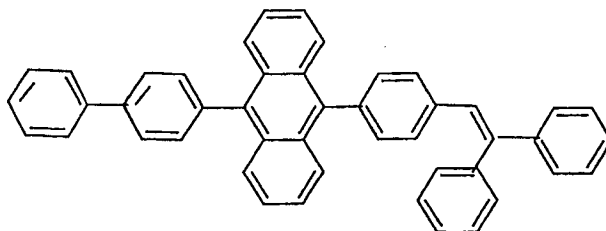
実施例 1 において、化合物 (A1) の代わりに特開 2000-273056 号公報に記載のアリールアントラセン化合物である下記 (C2) を用いた以外は同様にして有機 EL 素子を作製した。この素子の電圧、発光輝度、発光効率、発光色、化合物のガラス転移温度 T_g 及び高温保存試験結果を表 1 に示した。



(C2)

比較例 3

実施例 1 において、化合物 (A1) の代わりに特開 2000-273056 号公報に記載のアリールアントラセン化合物である下記 (C3) を用いた以外は同様にして有機 EL 素子を作製した。この素子の電圧、発光輝度、発光効率、発光色、化合物のガラス転移温度 T_g 及び高温保存試験結果を表 1 に示した。



(C3)

表 1

	発光層の 化合物	電圧 (V)	発光輝度 (cd/m ²)	発光効率 (cd/A)	発光色	化合物の T _g (°C)	高温保存試験
実施例 1	(A 1)	6. 0	1 7 6	2. 2	青	108	良好
実施例 2	(A 2)	6. 0	2 0 0	2. 3	青	120	良好
実施例 3	(A 3)	6. 0	1 6 1	3. 1	青	122	良好
実施例 4	(A 4)	6. 0	1 1 0	2. 3	青	115	良好
実施例 5	(A 5)	6. 0	7 8 0	2. 0	青	114	良好
実施例 6	(A 6)	6. 0	1 8 0	2. 8	青緑	112	良好
実施例 7	(A 1 0)	6. 0	2 5 0	2. 9	青	128	良好
実施例 8	(A 2 0)	6. 0	1 8 0	3. 1	青	124	良好
実施例 9	(B 1)	6. 0	2 6 0	2. 2	青	156	良好
実施例 10	(B 2)	6. 0	3 1 3	3. 1	青	152	良好
比較例 1	(C 1)	6. 0	1 2 0	2. 1	青緑	ND	結晶化
比較例 2	(C 2)	6. 0	1 2 5	2. 1	青	95	結晶化
比較例 3	(C 3)	6. 0	1 5 3	2. 5	青	109	結晶化

※高温保存試験結果においては、発光面に輝点又は色の変化が生じているなどにより欠陥が生じていない場合を良好とし、輝点、色の変化が生じている場合を結晶化とした。T_gの欄におけるNDはDSC（示差走査熱量測定）により観測されなかったということである。

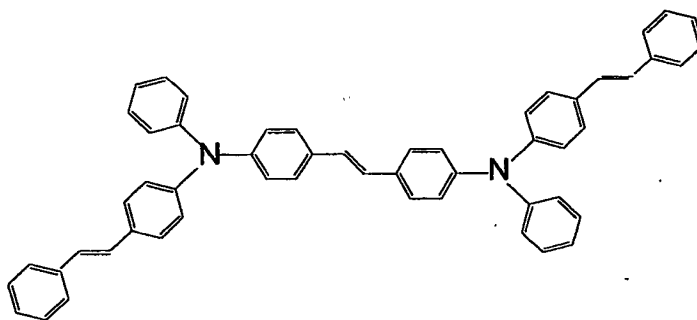
表 1 に示したように、対称性の良い C 1 を用いた比較例 1 では、結晶化が生じ発光面に欠陥が生じ、発光色も青緑色であり青色の純度が優れていない。また、比較例 2 及び 3 における化合物 C 2 及び C 3 は分子構造の左右が非対象であるが、結晶化が生じており、T_gが低いためであると考えられる。本発明の化合物は非対称でありかつ T_gが比較的高いため、高温保存試験の結果は良好であった。

実施例 1 1

2.5 mm×7.5 mm×1.1 mm厚のITO透明電極付きガラス基板（旭硝子社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に前記透明電極を覆うようにして膜厚60 nmのTPD 2 3 2を成膜した。このTPD 2 3 2膜は、正孔注入層として機能する。続けて、このTPD 2 3 2膜上に

膜厚 20 nm の BPTPD 膜を成膜した。この BPTPD 膜は正孔輸送層として機能する。さらに、BPTPD 膜上に膜厚 40 nm の上記化合物 (A1) を蒸着し成膜した。この膜は、発光層として機能する。この時同時に下記スチリルアミン系の発光分子 (D1) を 7 重量% 添加した。この膜上に膜厚 20 nm の Alq 膜を成膜した。この Alq 膜は、電子注入層として機能する。この後還元性ドパントである Li (Li 源: サエスゲッター社製) と Alq を二元蒸着させ、電子注入層 (陰極) として Alq : Li 膜を形成した。この膜上に金属 Al を蒸着させ金属陰極を形成し有機 EL 素子を形成した。

この素子は直流電圧 5.5 V で発光輝度 200 cd/m^2 、発光効率 5.5 cd/A の青色発光が得られた。また、初期輝度 500 cd/m^2 にて一定電流駆動を行ったところ輝度が半減する時間 (半減寿命) は 3000 時間であった。



(D1)

比較例 4

実施例 1 において、化合物 (A1) の代わりに米国特許第 05935721 号明細書に記載のアリールアントラセン化合物である上記 (C1) を用いた以外は同様にして有機 EL 素子を作製した。この素子の電圧、発光輝度、発光効率、発光色、化合物のガラス転移温度 T_g 及び高温保存試験結果を表 1 に示した。

この素子は、直流電圧 5.5 V で発光輝度 180 cd/m^2 、発光効率 5.0 cd/A の青色発光が得られた。また、初期輝度 500 cd/m^2 にて一定電流駆動を行ったところ輝度が半減する時間 (半減寿命) は 1500 時間と短かった。

。

産業上の利用可能性

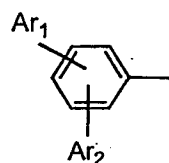
以上詳細に説明したように、本発明の新規芳香族化合物を利用すると、発光輝度及び発光効率が高く、色純度が高く、青色系に発光し、さらに高温安定性に優れ長寿命の有機エレクトロルミネッセンス素子が得られる。このため、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、各種電子機器の光源等として極めて有用である。

請求の範囲

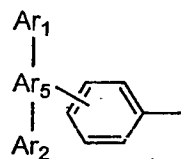
1. 下記一般式 (A) で表される新規芳香族化合物。



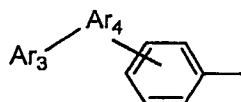
〔式中、Ar は、置換もしくは無置換のアントラセンディール基である。B は、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が 1 置換した炭素数 2 ～ 60 の複素環基又は置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 60 のアリール基である。A は、下記一般式 (1) ～ (11) から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されていてもよい。但し、B がアリールアミノ基で置換されている場合は、A はアリールアミノ基で置換されたフェニル基ではない。〕



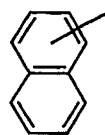
(1)



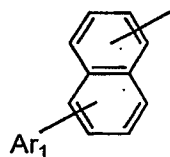
(2)



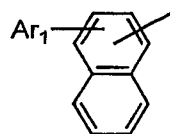
(3)



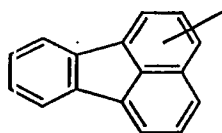
(4)



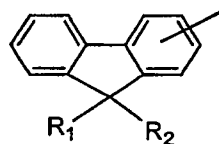
(5)



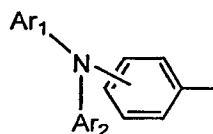
(6)



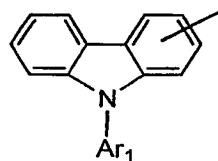
(7)



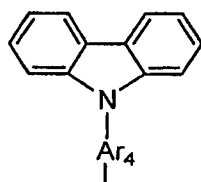
(8)



(9)



(10)



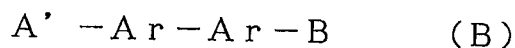
(11)

(式中、 $Ar_1 \sim Ar_3$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリール基、 Ar_4 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基、 Ar_5 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 の 3 価の芳香族残基である。 R_1 及び R_2 は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換の炭

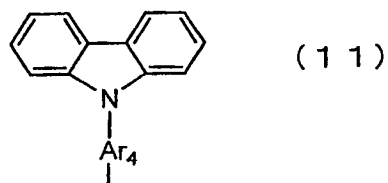
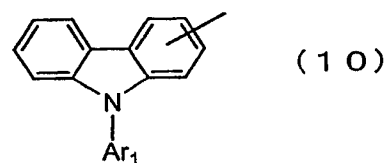
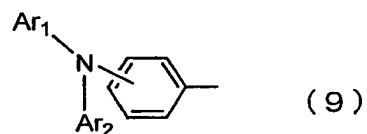
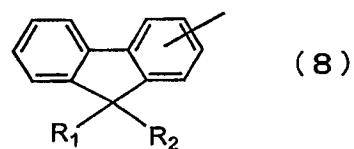
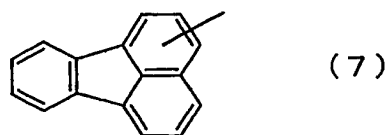
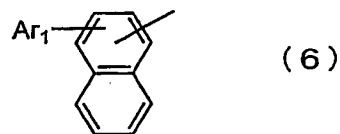
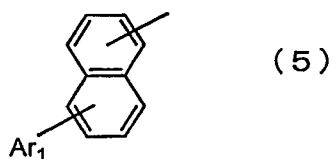
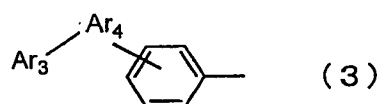
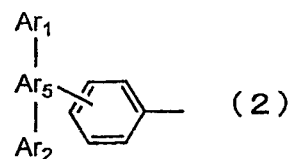
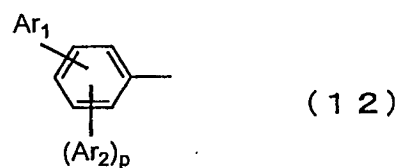
素数 1 ～ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 40 のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 40 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ～ 40 のシリル基、又はカルボキシル基である。また、 Ar_1 と Ar_2 及び R_1 と R_2 は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。)]

2. 前記一般式 (A) において、B は、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が 1 置換した炭素数 2 ～ 60 の複素環基又はアルケニル基もしくはアリールアミノ基が 1 置換した炭素数 5 ～ 60 のアリール基である請求項 1 に記載の新規芳香族化合物。

3. 下記一般式 (B) で表される新規芳香族化合物。



[式中、Ar は、置換もしくは無置換のアントラセンディール基である。B は、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が 1 置換した炭素数 2 ～ 60 の複素環基又は置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 60 のアリール基である。A' は、下記一般式 (2) ～ (12) から選ばれる基であり、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、又は置換もしくは無置換のフェニル基により置換されているもよい。但し、B がアリールアミノ基で置換されている場合は、A' はアリールアミノ基で置換されたフェニル基ではない。]



(式中、 $Ar_1 \sim Ar_3$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリール基、 Ar_4 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基、 Ar_5 は置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 の 3 価の芳香族残基である。 R_1 及び R_2 は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、

置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 40 の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 40 の芳香族複素環基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 40 のアラルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 40 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ～ 40 のシリル基、又はカルボキシル基である。また、 Ar_1 と Ar_2 及び R_1 と R_2 は、それぞれ独立に、互いに結合し環状構造を形成してもよい。式 (12) の p は、0 又は 1 である。
)}]

4. 前記一般式 (B) において、B は、アルケニル基もしくはアリールアミノ基が 1 置換した炭素数 2 ～ 60 の複素環基又はアルケニル基もしくはアリールアミノ基が 1 置換した炭素数 5 ～ 60 のアリール基である請求項 3 に記載の新規芳香族化合物。
5. 有機エレクトロルミネッセンス素子用材料である請求項 1 ～ 4 のいずれかに記載の新規芳香族化合物。
6. 陰極と陽極間に少なくとも発光層を含む一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機エレクトロルミネッセンス素子において、該有機薄膜層の少なくとも 1 層が、請求項 1 ～ 4 のいずれかに記載の芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有する有機エレクトロルミネッセンス素子。
7. 前記有機薄膜層が、電子輸送層及び／又は正孔輸送層を有し、該電子輸送層及び／又は正孔輸送層が、請求項 1 ～ 4 のいずれかに記載の芳香族化合物を単独もしくは混合物の成分として含有する有機エレクトロルミネッセンス素子。
8. 前記発光層が、さらにアリールアミン化合物を含有する請求項 6 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

9. 前記発光層が、さらにスチリルアミン化合物を含有する請求項6に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10. 電子輸送領域、又は陰極と有機薄膜層の界面領域に、還元性ドーパントを含有する請求項6に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

11. 青色系発光する請求項6に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP03/04905

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int.Cl.⁷ C07C15/60, 13/66, 13/567, 211/54, C07D209/86, 215/04,
C09K11/06, H05B33/14, 33/22

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int.Cl.⁷ C07C15/60, 13/66, 13/567, 211/54, C07D209/86, 215/04,
C09K11/06, H05B33/14, 33/22

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CAPLUS (STN), CAOLD (STN), REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 02/14244 A1 (Mitsui Chemicals, Inc.), 21 February, 2002 (21.02.02), & JP 2002-154993 A & EP 1221434 A1 & US 2003/87126 A1	1-11
X A	WO 01/76323 A1 (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 11 October, 2001 (11.10.01), & JP 2001-284050 A & EP 1191822 A1 & US 2002/48688 A1	1, 3, 5-11 2, 4
X A	JP 2001-97897 A (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 10 April, 2001 (10.04.01), (Family: none)	1, 5-11 2
X A	JP 11-329732 A (Toppan Printing Co., Ltd.), 30 November, 1999 (30.11.99), (Family: none)	1, 5-11 2

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:	"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"E" earlier document but published on or after the international filing date	"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)	"&" document member of the same patent family
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	

Date of the actual completion of the international search
13 June, 2003 (13.06.03)

Date of mailing of the international search report
01 July, 2003 (01.07.03)

Name and mailing address of the ISA/
Japanese Patent Office

Authorized officer

Facsimile No.

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.,

PCT/JP03/04905

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X A	WO 01/72673 A1 (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 04 October, 2001 (04.10.01), & EP 1182183 A1 & US 2002/48687 A1	3, 5-11 4
X A	EP 681019 A2 (TDK Corp.), 08 November, 1995 (08.11.95), & JP 8-12600 A & US 5635308 A	3, 5-11 4

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC)) Int. Cl ⁷ C07C15/60、13/66、13/567、211/54、 C07D209/86、215/04、 C09K11/06、H05B33/14、33/22		
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC)) Int. Cl ⁷ C07C15/60、13/66、13/567、211/54、 C07D209/86、215/04、 C09K11/06、H05B33/14、33/22		
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの		
国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語) CAPLUS (STN)、CAOLD (STN)、REGISTRY (STN)		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
X	WO 02/14244 A1 (三井化学株式会社) 2002.02.21 & JP 2002-154993 A & EP 1221434 A1 & US2003/87126 A1	1-11
X A	WO 01/76323 A1 (出光興産株式会社) 2001.10.11 & JP 2001-284050 A & EP 1191822 A1 & US2002/48688 A1	1,3,5-11 2,4
X A	JP 2001-97897 A (出光興産株式会社) 2001.04.10 (ファミリーなし)	1,5-11 2
<input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー 「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの 「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの 「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す) 「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願日の後に公表された文献 「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの 「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの 「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの 「&」 同一パテントファミリー文献		
国際調査を完了した日 13.06.03	国際調査報告の発送日 01.07.03	
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁 (ISA/J P) 郵便番号100-8915 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	特許庁審査官 (権限のある職員) 藤森 知郎 電話番号 03-3581-1101 内線 3443	4H 9357

C (続き). 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
X A	JP 11-329732 A (凸版印刷株式会社) 1999. 11. 30 (ファミリーなし)	1,5-11 2
X A	WO 01/72673 A1 (出光興産株式会社) 2001. 10. 04 & EP 1182183 A1 & US 2002/48687 A1	3,5-11 4
X A	EP 681019 A2 (TDK Corporation) 1995. 11. 08 & JP 8-12600 A & US 5635308 A	3,5-11 4